

PHASENÜBERGÄNGE IN INHOMOGENEN SYSTEMEN

WOLFGANG SPETH

PHASENÜBERGÄNGE IN INHOMOGENEN SYSTEMEN

Dissertation

der Fakultät für Physik

der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

Wolfgang Speth

aus Saarlouis

München, den 9. April 1986

1. Gutachter: Prof. Dr. H. Wagner

2. Gutachter: Prof. Dr. K. Stierstadt

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juni 1986

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung	5
2. Halbunendliche Systeme	8
3.1 Multiskalenfaktoruniversalität	21
3.2 ϵ -Entwicklung in der symmetrischen Phase	27
3.3 Ordnungsparameterprofil	30
3.4 ϵ -Entwicklung in der geordneten Phase	41
3.5 Universelle Amplitudenverhältnisse	44
4.1 Benetzungsübergänge	50
4.2 Molekularfeldtheorie für Benetzungsübergänge	53
4.3 Kritische Benetzung	67
4.4 Grenzflächendelokalisierung bei Supraleitern	69
4.5 Monte-Carlo-Simulation von Benetzungsübergängen	76
5.1 Der Einfluß elastischer Kräfte auf Phasenübergänge	90
5.2 Einfluß auf Phasenübergänge im Volumen	92
5.3 Einfluß auf Benetzungsübergänge	99
5.4 Erzwungene Domänenbildung	105
5.5 Makromoden	111
5.6 Domänenstruktur in magnetostriktiven Systemen	118
Literaturverzeichnis	123
Lebenslauf	131

1. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich hauptsächlich mit dem Einfluß von Oberflächen auf Phasenübergänge. Die universellen kritischen Eigenschaften kontinuierlicher Phasenübergänge im Volumen werden durch die Existenz von Oberflächen um interessante Größen bereichert. Für den gewöhnlichen und den multikritischen Oberflächenphasenübergang wird zunächst mit feldtheoretischen Renormierungsmethoden in 1.Ordnung in einer Entwicklung um 4 Dimensionen das Profil für einen einkomponentigen Ordnungsparameter berechnet. Aus den Renormierungsgruppengleichungen für die Korrelationsfunktionen folgt eine Multiskalenfaktoren-Universalität für die thermodynamischen Größen : während es im Volumen nur zwei nichtuniverselle Skalen gibt, nämlich die für Temperatur und Magnetfeld, besitzt der gewöhnliche Obergang eine dritte nichtuniverselle Skala für das Oberflächenfeld und der multikritische Punkt eine vierte, die die Stärke der Oberflächenkopplungen charakterisiert. Die Renormierungsgruppe bestätigt somit den phänomenologischen Ansatz, der für jedes relevante Skalenfeld eine nichtuniverselle Skala fordert. Universelle Verhältnisse zwischen den nichtuniversellen Amplituden einiger wichtiger Oberflächengrößen werden in 1.Ordnung in $\epsilon=4-d$ ausgerechnet und mit bereits existierenden Monte-Carlo-Daten und exakten Ergebnissen in zwei Dimensionen verglichen. Wie zu erwarten ist, sind die Ergebnisse gegenüber Molekularfeldresultaten deutlich verbessert. Es verbleiben

allerdings immer noch große Diskrepanzen zu den Monte-Carlo-Daten.

Auch Modelle mit einem Phasenübergang 1.Ordnung im Volumen haben im Zusammenhang mit Oberflächen großes Interesse gefunden. Es stellte sich nämlich heraus, daß sie einen kontinuierlichen Übergang in der Oberfläche mit universellen kritischen Exponenten haben können. Diese "Oberflächen-induzierte-(Un-)Ordnung" (engl. SID, SIO) steht in engem Zusammenhang mit dem von Cahn entdecktem Benetzungsübergang. Im Rahmen der Landau-Theorie werden einfache Modelle gelöst und ihre kritischen Exponenten und Phasendiagramme berechnet. Eine parallel dazu ausgeführte Monte-Carlo-Simulation bestätigt die theoretischen Ergebnisse. Darüber hinaus wird der Einfluß eines inhomogenen, zufällig verteilten Oberflächenfeldes simuliert. Es stellt sich heraus, daß dies in $d=3$ für einen kontinuierlichen Benetzungsübergang irrelevant ist. Ein Übergang 1.Ordnung dagegen kann durch die Inhomogenität zu einem kontinuierlichen hin verändert werden.

Ein weiterer Schritt hin zur Realstruktur von Festkörpern besteht in der Hinzunahme einer Kopplung zwischen Ordnungsparameter und Gitter (Magnetostriktion etc.). Es wird eine Methode vorgestellt, die es erlaubt, die bisher existierenden Ergebnisse über den Einfluß einer solchen Kopplung auf Phasenübergänge im Volumen in einheitlicher Weise zu reproduzieren und auch noch weitergehende Aussagen zu treffen. Es zeigt sich, daß eine solche elastische Kopplung immer zu einem diskontinuierlichen Benetzungsübergang führt. Schließlich wird gezeigt, daß die elastischen Kräfte aufgrund ihrer langen Reichweite auch im Volumen zu inhomogenen Strukturen führen können. Aufgrund von restriktiven Randbedingungen für die elastische Verschiebung kann es in der Nähe von

Phasenübergängen 1.Ordnung zu einer Domänenstruktur kommen. Die relativen Anteile der verschiedenen Phasen können durch eine intensive thermodynamische Variable kontrolliert werden. Dies läßt sich verstehen als eine Rotation des Zweiphasengebietes im Zustandsraum. Alle wichtigen thermodynamischen Größen und auch die Änderung des kritischen bzw. trikritischen Verhaltens werden exakt ausgerechnet. Aufgrund von starken Kohärenzspannungen der Domänenstruktur können auch metastabile, langsam variierende Ordnungsparameterverteilungen existieren. Diese werden in einer Entwicklung nach Kugelfunktionen ausgerechnet.

2. Halbunendliche Systeme

Die Entdeckung der Renormierung in der statistischen Physik durch Wilson^{1,2} war ein einzigartiger Durchbruch im Verständnis der kritischen Phänomene. Seit der Einführung statistischer Methoden in die Thermodynamik durch Gibbs und Boltzmann war es ein Ziel der theoretischen Physik, Phasenübergänge nicht nur phänomenologisch beschreiben sondern auch aufgrund der mikroskopischen Wechselwirkung zwischen Teilchen verstehen und herleiten zu können. Das Interesse konzentrierte sich dabei bald auf Phasenübergänge 2.Ordnung, da diese sich durch universelle Größen charakterisieren lassen, wie man durch die Landau- oder Molekularfeldtheorie³⁻⁵ und die Onsager'sche Lösung des zweidimensionalen Isingmodells⁶⁻⁸ sowie durch experimentelle Beobachtungen schon wußte. Universelle Größen in diesem Sinne sind die kritischen Exponenten, die die Singularitäten thermodynamischer Potentiale und ihrer Ableitungen in der Nähe eines kritischen Punktes bestimmen. Universalität bedeutet einmal, daß der Satz der kritischen Exponenten der gleiche ist für alle Elemente einer Universalitätsklasse, die so verschiedenartige physikalische Systeme umfassen kann wie uniaxiale Ferro- und Antiferromagnete, Flüssigkeiten, binäre Mischungen und Legierungen, oder auch superflüssiges Helium, Supraleiter und planare Magnete. Im engeren Sinne heißt Universalität, daß die kritischen Exponenten eines gegebenen Systems nicht abhängen von der Stärke der Wechselwirkungen, also z.B. den Austauschwechselwirkungen eines Magnetens. Ersteres wird zum Teil dadurch erreicht, daß verschiedene Systeme auf das gleiche Modell abgebildet werden. So ist zum Beispiel die

Gittergasbeschreibung einer Flüssigkeit oder eines Gases äquivalent zum Isingmodell eines uniaxialen Ferromagneten. Ein umfassenderes Verständnis der Universalität brachten aber erst die Renormierungsmethoden der statistischen Physik^{1,2,9-19}. Diese Methoden beruhen alle darauf, daß man untersucht, wie sich ein gegebenes System (repräsentiert durch seine Hamiltonfunktion) bei Ausdünnung von Freiheitsgraden und Reskalierung der zugrundeliegenden Längenskala verändert. Diese (Renormierungsgruppen-) Transformation (RGT) kann dargestellt werden als Fluß im abstrakten Raum der Hamiltonfunktionen (siehe Fig.1). Das Einzugsgebiet eines Fixpunktes unter der RGT stellt alle Mitglieder einer Universalitätsklasse an ihrem kritischen Punkt dar. Ihre Hamiltonfunktionen unterscheiden sich nur in "irrelevanten" Parametern, d.h., sie werden unter sukzessiver Anwendung der RGT alle auf den gleichen Fixpunkt hin abgebildet, dessen Umgebung allein die kritischen Exponenten bestimmt.

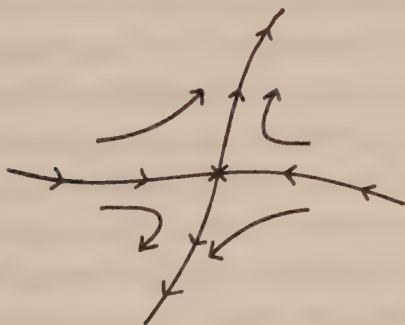


Fig.1: Renormierungsfluß im Raum der Hamiltonfunktionen. Gezeigt ist ein Fixpunkt mit einer relevanten und einer irrelevanten Richtung.

Wichtige Unterscheidungsmerkmale der Klassen sind die Zahl der Komponenten des Ordnungsparameters, die Reichweite der Wechselwirkung (lang- oder kurzreichweitig) und die Art der Symmetrioperationen im Ordnungsparameterraum, die die Hamiltonfunktion invariant lassen.

Die Renormierungsgruppe liefert allerdings noch mehr als die Universalität der Exponenten. In der Nähe eines kritischen Punktes sagt sie für die Freie Energie und für Korrelationsfunktionen eine Skalenform voraus, d.h., die Freie Energie $f(t, H)$ beispielsweise eines Ferromagneten in der Nähe der Curietemperatur T_c ($t = |T - T_c|/T_c$) hängt nicht in beliebiger Weise von Temperatur T und Magnetfeld H ab, sondern in einer bestimmten Kombination der beiden²⁰⁻²²:

$$f(t, H) = |E_t^* t|^{2-\alpha} g(E_H^* H / |E_t^* t|^\Delta) \quad (2.1)$$

Dies impliziert zunächst einmal viele (sog. Skalen-)Relationen zwischen den kritischen Exponenten, die sich alle durch α und Δ ausdrücken lassen. Weiterhin ist die Funktion $g(x)$ für alle Elemente einer Universalitätsklasse die gleiche. Alle systemabhängigen Größen wie Kopplungskonstantenstärken, Gitterkonstante usw. werden in den nichtuniversellen Skalen E_t^* und E_H^* absorbiert. Dies ist natürlich eine sehr starke Einschränkung an die möglichen Ergebnisse eines Experiments und hilft so, die Anzahl der Fitparameter stark zu beschränken. Die Form (2.1) impliziert insbesondere, daß gewisse Verhältnisse der Amplituden des singulären Anteils thermodynamischer Größen universell sind. Bervillier²² berechnete diese universellen Verhältnisse im Rahmen der ϵ -Entwicklung.

Bis etwa in die Mitte der 70er Jahre hinein war die theoretische Diskussion auf homogene Systeme beschränkt. Unter einem homogenen System verstehe ich dabei eines, dessen Hamiltonfunktion invariant ist gegenüber Translationen (auf dem Gitter oder im Kontinuum). Notwendig dafür ist insbesondere, daß das System in alle Richtungen unendlich ausgedehnt ist, denn Endlichkeit in einer Richtung impliziert eine Oberfläche, die die Translationsinvarianz zerstört. Auch Systeme, in denen zufällig verteilt Verunreinigungen eingebaut sind, sind nur im Mittel translationsinvariant und damit inhomogen. Nach der gegebenen Definition sind natürlich reale physikalische Systeme immer inhomogen, da sie notwendigerweise endlich sind und fast immer Verunreinigungen oder Störungen enthalten. Es ist deshalb verständlich, daß sich in den letzten Jahren sowohl die Theoretiker²³⁻³⁹ als auch die Experimentatoren⁴⁰⁻⁴⁴ verstärkt den inhomogenen Systemen zuwenden. Zwei Schwerpunkte haben sich dabei herausgestellt : Systeme mit einer Oberfläche als einfachste Realisierung einer gebrochenen Translationsinvarianz und zum anderen ungeordnete Systeme, in deren theoretischer Beschreibung die Unordnung mit Zufallsfeldern und Zufallskopplungen simuliert wird (Spingläser)^{45,46}. Auch die Endlichkeit eines Systems in einer oder mehreren Dimensionen (Platten, Zylinder) wird untersucht. Diese sogenannten Finite-Size-Effekte^{47,48} machen sich in der Nähe eines Phasenübergangs dann bemerkbar, wenn die Korrelationslänge so groß wie die kleinste Lineardimension wird. Je nach Typ des untersuchten Systems kann es dabei zu einem Crossover zwischen dem für verschiedene Dimensionen typischen Verhalten oder zu einer Verschiebung und Abrundung der Singularitäten kommen.

Die Fragestellungen dabei sind : lassen sich die Konzepte und die Methoden, die sich für die homogenen Systeme bewährt haben, auch auf die inhomogenen anwenden ? Welche Verallgemeinerungen werden dazu nötig sein und welche neuen Exponenten und Universalitätsklassen kommen dazu ? Schließlich muß man auch völlig neue Phänomene wie die später besprochenen Grenzflächendelokalisierungsübergänge oder z.B. Spinglas-übergänge erwarten. Gerade das Beispiel des Spinglases zeigt, daß die bisher entwickelten Ideen und Methoden keineswegs ausreichend sein müssen, um die inhomogenen Systeme zu verstehen.

Alle diese Fragen stoßen keineswegs nur auf akademisches Interesse. Die Oberflächenphysik und die Physik dünner Schichten findet schon seit langem Anwendung in der Technik. Die Theorie der ungeordneten Systeme könnte wichtig werden für das Verständnis der Eigenschaften amorpher Halbleiter und Werkstoffe. Auch die Adsorption von Polymeren an Substraten⁴⁹⁻⁵¹ und der Einfluß von Phasenübergängen auf chemische Reaktionen an Oberflächen⁵²⁻⁵⁵ fallen unter diese Fragestellungen. Schließlich sollte man nicht vergessen, welche enorme Bedeutung Oberflächen und Grenzflächen (sowie inhomogene Systeme im allgemeinen) in der Biologie haben. Hier wird sich bestimmt noch ein großer Anwendungsbereich auf tun⁵⁶.

Der überwiegende Teil dieser Arbeit wird sich mit der Brechung der Translationsinvarianz durch Oberflächen und ihren Folgen befassen. Erst in Kapitel 4 werde ich eine Kombination von Oberflächen und stochastischen Feldern und ihre Implikation für Benetzungsübergänge betrachten. Kapitel 5 schließlich wird zeigen, daß eine inhomogene Struktur auch in unendlich großen homogenen Systemen auftreten kann, wenn die zugrunde-

liegende Wechselwirkung langreichweitig ist.

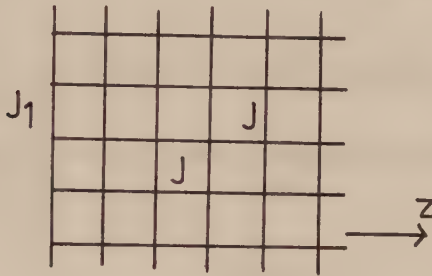


Fig.2: Halbunendliches Spingitter

Halbunendliche Systeme dienen der theoretischen Beschreibung von Körpern mit einer Oberfläche. Sie bestehen aus einem Gitter im

$\mathbb{R}^d_{/2} = \{(x_1, \dots, x_d) \mid x_i \in \mathbb{Z}, i=1..d-1, x_d \equiv z \geq 0\}$, das auf den Halbraum $z > 0$

beschränkt ist, so daß eine freie Oberfläche bei $z=0$ entsteht (siehe

Fig.2). Da das Volumen unendlich groß ist, ist der thermodynamische

Limes schon durchgeführt. Betrachten wir ein "magnetisches" Modell

(wegen der Universalität spielen Details der Beschreibung keine Rolle),

bei dem auf den Gitterplätzen n -komponentige "Spins" $\underline{S}_i$ sitzen, die im

Volumen mit der Austauschkonstanten J wechselwirken. In der Nähe der

Oberfläche werden die Kopplungen im allgemeinen davon verschieden sein,

da die Elektronenwellenfunktionen verändert sind und das Gitter relax-

iert oder gar rekonstruiert. Dies wird pauschal berücksichtigt durch

die Kopplungskonstante J_1 in der ersten Schicht. Außerdem kann na-

türlich das zum Ordnungsparameter $\underline{S}$ konjugierte Magnetfeld in der

Oberfläche ($=H_1$) von dem im Volumen ($=H$) verschieden sein. Die Hamiltonfunktion dieses Modells ist

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i H_i S_i \quad (2.2)$$

wobei $\langle i, j \rangle$ wie üblich eine Summation über alle Paare von nächsten Nachbarn bedeutet und

$$J_{ij} = \begin{cases} J_1, & i \text{ und } j \text{ in der 1. Schicht} \\ J, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$H_i = \begin{cases} H_1, & i \in 1 \\ H, & \text{sonst} \end{cases} .$$

Die Freie Energie $F = -k_B T \ln \sum e^{-\beta \mathcal{H}}$ des Gittermodells (2.2) wird einen volumen- und einen oberflächenproportionalen Anteil haben :

$$F(K, K_1, H, H_1) = V f_B(K, H) + A f_S(K, K_1, H, H_1) \quad (2.3)$$

mit $K = J/kT$, $K_1 = J_1/kT$. In f_S sind die Informationen über oberflächenspezifische Größen wie zum Beispiel den Ordnungsparameter in der ersten Schicht $m_1 = -\partial f_S / \partial H_1$ enthalten (andere wichtige Größen werden weiter unten definiert). Das Phasendiagramm der Gitterhamiltonian (2.2), das im Rahmen von Molekularfeldnäherung²⁴⁻²⁶, mit Realspace-Renormierungsmethod-

en³⁸ oder durch Monte-Carlo-Simulation^{57,58} bestimmt werden kann, ist in Fig.3 gezeigt.

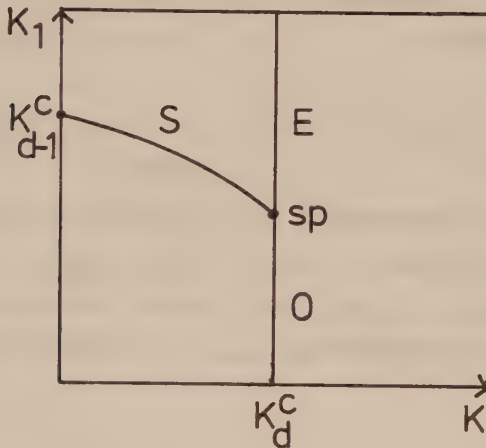


Fig.3: Phasendiagramm des halbbunendlichen Isingmodells

Wenn die Kopplungskonstante K_1 nicht zu groß ist, ordnet die Oberfläche zusammen mit dem Volumen bei deren kritischer Kopplung K_d^C . Diesen Phasenübergang nennt man den gewöhnlichen Obergang. Für genügend starke K_1 kann die Oberfläche unabhängig vom Volumen bei einer höheren Temperatur ordnen. Bedingung für diesen sogenannten Oberflächenübergang ist natürlich, daß das $(d-1)$ -dimensionale System zu einer geordneten Phase fähig ist. Für $K=0$ endet diese Linie dann bei der kritischen Kopplung K_{d-1}^C des $(d-1)$ -dimensionalen Systems, dessen Satz kritischer Exponenten auf der ganzen Linie gilt. Den Phasenübergang des Volumens bei geordneter Ober-

fläche schließlich bezeichnet man als außergewöhnlichen Übergang. Die drei Linien treffen sich in dem mit sp bezeichneten multikritischen Punkt. Ein Phasenübergang durch ihn heißt besonderer Übergang. Zur Verdeutlichung sind in Fig.4 die Ordnungsparameterprofile in der Nähe der verschiedenen Übergänge dargestellt.

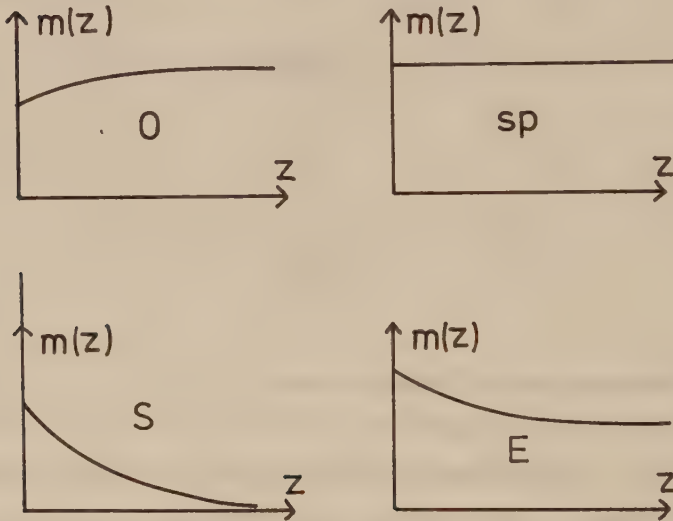


Fig.4: Ordnungsparameterprofile an den vier Phasenübergängen aus Fig.3

Eine wichtige Konsequenz der Einführung einer Oberfläche ist offenbar eine Aufspaltung der Universalitätsklassen : Systeme, die bezüglich des Volumenphasenübergangs in die gleiche Universalitätsklasse fallen, können sich bezüglich ihres Oberflächenübergangs unterscheiden. Um deren univer-

sellen Eigenschaften zu berechnen, kann man anstelle der Gitterhamiltonian (2.2) auch eine Kontinuumsnäherung verwenden, da die in der Nähe eines Phasenübergangs 2.Ordnung divergierende Korrelationslänge die Gitterstruktur unwesentlich werden läßt. Diese Näherung führt zu einer Hamiltonfunktion (dividiert durch kT)

$$\mathcal{H}\{\phi\} = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{\tau}{2}\phi^2 + \frac{g}{4!}\phi^4 - h\phi \right\} + \int d^{d-1}x \left\{ \frac{c_0}{2}\phi^2 - h_1\phi \right\}, \quad (2.4)$$

wobei sich das erste Integral über den Halbraum $z \geq 0$ und das zweite über die Oberfläche bei $z=0$ erstreckt. ϕ ist ein n -komponentiger Vektor, dessen Komponenten kontinuierliche Werte annehmen können. c_0 hängt mit den Gitterkopplungen und der Gitterkonstanten a folgendermaßen zusammen :

$$c_0 = a^{-1}(1 - 2(d-1)(J_1/J-1)) \quad . \quad (2.5)$$

Eine wichtige Größe ist der Ordnungsparameter als Funktion von Temperatur τ und Abstand z zur Oberfläche

$$m(z) = \langle \phi(r, z) \rangle, \quad (2.6)$$

der in 3.3 in 1.Ordnung in $\epsilon=4-d$ berechnet wird. Durch Spezialisierung gewinnt man die Ordnungsparameter im Volumen und in der Oberfläche :

$$m_b = m(\infty) \sim |\tau - \tau_c|^\beta \quad (2.7)$$

$$m_1 = m(0) \sim |\tau - \tau_c|^{\beta_1} \quad (2.8)$$

Weiter sind von Bedeutung die lokalen Suszeptibilitäten

$$\chi(z) = \alpha m(z)/h \quad (2.9)$$

$$\chi_{1,1} = \alpha m_1 / \partial h_1 \sim |\tau - \tau_c|^{-\gamma_{11}} \quad (2.10a)$$

$$\chi_1 = \chi(0) \sim |\tau - \tau_c|^{-\gamma_1} \quad (2.10b)$$

sowie die Exzessgrößen

$$\chi_s = \int_0^\infty (\chi(z) - \chi_b) dz \sim |\tau - \tau_c|^{-\gamma_s} \quad (2.11)$$

$$m_s = \int_0^\infty (m(z) - m_b) dz \sim |\tau - \tau_c|^{\beta_s} \quad (2.12)$$

Streuexperimente⁵⁹⁻⁶² messen die Zweipunkt-Korrelationsfunktion

$$G(x, x') = \langle \phi(x) \phi(x') \rangle \quad (2.13)$$

die sich am kritischen Punkt verhält wie

$$\begin{aligned} & |r - r'|^{-(d-2+\eta_{||})} \quad , \quad |r - r'| \rightarrow \infty \\ G(r, z, r', z') & \sim \\ & |z - z'|^{-(d-2+\eta_{\perp})} \quad , \quad |z - z'| \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.14)$$

Das Modell (2.4) wurde schon früh in Molekularfeldnäherung und später auch

mit Renormierungsmethoden untersucht. Sein Phasendiagramm (Fig.5) ist äquivalent zu dem des Gittermodells.

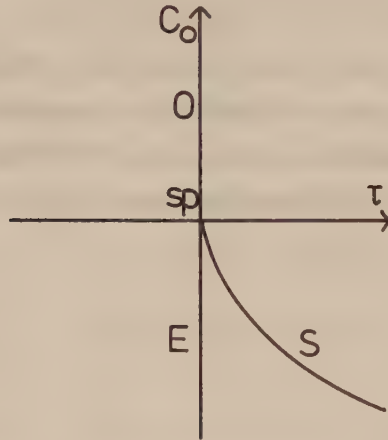


Fig.5: Phasendiagramm der Kontinuumshamiltonfunktion (2.4)

Diehl und Dietrich haben in mehreren Arbeiten die Oberflächenexponenten bis zur Ordnung ϵ^2 für den gewöhnlichen und den multikritischen Übergang sowie den Crossover zwischen den beiden berechnet. Sie bedienten sich dabei der feldtheoretischen Renormierung mit Dimensionsregularisierung. Dabei wird der quartische Anteil der Hamiltonian (2.4) in eine Störungsreihe nach der Kopplung g entwickelt. Diagonalisieren des quadratischen Anteils liefert in der symmetrischen Phase den parallel zur Oberfläche fouriertransformierten Propagator

$$G_0(p, z, z') = (2\kappa)^{-1} \left(\exp(-\kappa|z-z'|) + (\kappa - c_0)/(\kappa + c_0) \exp(-\kappa(z+z')) \right) \quad (2.15)$$

wobei $\kappa = (p^2 + \tau)^{1/2}$ und p der Impuls parallel zur Oberfläche ist.

Bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen

$$G^{(N,M)}(x_1, \dots, x_N, r_1, \dots, r_M) = \langle \prod_{i=1}^N \phi(x_i) \prod_{i=1}^M \phi(r_i, 0) \rangle \quad (2.16)$$

mit dem Propagator (2.15) treten bei den internen Impulsintegrationen Divergenzen auf, die sich als Polterme in $\epsilon=4-d$ darstellen lassen. Diese Polterme können absorbiert werden in einer Umdefinition der Kopplungskonstanten sowie einer "Wellenfunktionsrenormierung" für ϕ :

$$\begin{aligned} \tau &= \mu^2 Z_t t \\ g &= \mu^{\epsilon} 2^d \pi^{d/2} Z_u u \\ c_0 &= \mu Z_c c \\ \phi(x) &= Z_\phi^{1/2} \phi_R(x) \\ \phi(r, 0) &= (Z_\phi Z_1)^{1/2} \phi_R(r, 0) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Dabei ist μ ein willkürlicher Impulsmaßstab. Die Kenntnis der Z -Faktoren Z_ϕ, Z_1, Z_t und Z_c , die in ²⁸ angegeben sind, ist gleichbedeutend mit der Kenntnis der kritischen Exponenten.

3.1 Multiskalenfaktoruniversalität

Die Absorption der Divergenzen des Kontinuumsmodells in den Z-Faktoren erscheint zunächst nur als eine Notwendigkeit, um die Störungstheorie überhaupt zu definieren. Die Einführung eines willkürlichen Impulsmaßstabs μ gewährt jedoch die Möglichkeit, das Verhalten der Korrelationsfunktion auf wechselnden Längenskalen zu studieren, was in der statistischen Physik ja das Ziel jeder Renormierung ist. Nach (2.16) und (2.17) besteht zwischen den renormierten und den nackten Korrelationsfunktionen der Zusammenhang

$$G_0^{(N,M)}(\tau, c_0, g, h_0, h_{1,0}, x) = Z_1^{-M/2} Z_\Phi^{-(N+M)/2} G_R^{(N,M)}(t, c, u, h, h_1, x, \mu) \quad (3.1)$$

Die renormierten Felder h und h_1 sind dabei definiert durch

$$h = \mu^{-(d+2)/2} Z_\Phi^{1/2} h_0 \quad (3.2)$$

$$h_1 = \mu^{-d/2} (Z_\Phi Z_1)^{1/2} h_{1,0}$$

Durch Ableiten nach μ erhält man aus (3.1) für die Korrelationsfunktion die Renormierungsgruppengleichung (RGG)

$$\{\mu \partial_\mu + \beta \partial_\mu - (2 + \eta_t) t \partial_t - (1 + \eta_c) c \partial_c + (N+M)/2 \eta_\Phi + M/2 \eta_1 \quad (3.3)$$

$$- (d+2-\eta_\Phi)/2 h \partial_h - (d-\eta_\Phi-\eta_1) h_1 \partial_{h_1}\} G_R^{(N,M)}(t, c, u, h, h_1, x, \mu) = 0$$

wobei $\eta_i(u) = \mu \partial_\mu \ln Z_i$. Die Nullstelle der Wilsonfunktion $B(u) = \mu \partial_\mu$

bestimmt den Fixpunkt u^* . Die partielle Differentialgleichung kann leicht mit der Methode der Charakteristiken gelöst werden und führt dann auf eine Skalenform für die Korrelationsfunktionen :

$$G_R^{(N,M)}(t, c, u, h, h_1, x, u) = x^{\eta(N,M)+d(N,M)} E_h^N E_{h_1}^M G_R^{(N,M)}(t(x), c(x), u(x), h(x), h_1(x), x u x, 1) \quad (3.4)$$

Dabei ist $d(N,M) = \frac{d-2}{2}(N+M)$ die naive Dimension, $\eta(N,M) = (N+M)\eta_\phi(u^*)/2 + M\eta_1(u^*)/2$ die anormale Dimension von $G_R^{(N,M)}$ und die fließenden Kopplungskonstanten sind gegeben durch

$$t(x) = E_t x^{-1/\nu} t, \quad c(x) = E_c x^{-\phi/\nu} c$$

$$h(x) = h x^{-\Delta/\nu} E_h, \quad h_1(x) = h_1 x^{-\Delta_1/\nu} E_{h_1} \quad (3.5)$$

und $x =: \exp(\int_u^u \beta^{-1}(u') du')$.

Die Skalenfaktoren E_i und die Exponenten schreiben sich

$$E_t = \exp(-\int_u^u (\eta_t - \eta_t^*)/\beta du'), \quad \nu = (2 + \eta_t^*)^{-1}$$

$$E_c = \exp(-\int_u^u (\eta_c - \eta_c^*)/\beta du'), \quad \phi = \nu(1 + \eta_c^*)$$

$$E_h = \exp(-\int_u^u (\eta_\phi^* - \eta_\phi)/2\beta du'), \quad \Delta = \nu/2(d + 2 - \eta_\phi^*)$$

$$E_{h_1} = \exp(-\int_u^u (\eta_\phi^* + \eta_1^* - \eta_\phi - \eta_1)/2\beta du'), \quad \Delta_1 = \nu/2(d - \eta_\phi^* - \eta_1^*)$$

(3.6)

Dabei ist $n_i^* = n_i(u^*)$. Der Fluß der Kopplungskonstanten wie in (3.5) angegeben, ist eine explizite Darstellung des abstrakten Flusses im Raum der Hamiltonfunktionen, der in Fig.1 symbolisch gezeigt ist. Wie aus der letzten Gleichung in (3.5) ersichtlich, ist $\lambda \rightarrow \infty$ gleichbedeutend mit $u \rightarrow u^*$. Dies kann erreicht werden durch $t \rightarrow 0$ unter der Nebenbedingung $t(\lambda)=1$. Bei Annäherung an den kritischen Punkt $t=0$ geht die Kopplungskonstante u also unabhängig von ihrem Anfangswert zum Fixpunkt u^* . Elimination von λ aus der Forderung $t(\lambda)=1$ führt daher im Limes $t \rightarrow 0$ auf die endgültige Skalensform für die Korrelationsfunktionen :

$$G_R^{(N,M)}(t,c,u,h,h_1,x,\mu) = \mu^{d(N,M)} (E_t^*)^{\nu(d(N,M)+n(N,M))} E_h^{*N} E_{h_1}^{*M} \quad (3.7)$$

$$\Xi^{(N,M)}(cE_c^*(tE_t^*)^{-\phi}, hE_h^*(tE_t^*)^{-\Delta}, h_1E_{h_1}^*(tE_t^*)^{-\Delta}, x/\xi)$$

mit $E_i^* = E_i(u(\lambda) \rightarrow u^*)$. Die Skalenfunktion $\Xi^{(N,M)}(a,b,c,d) = G_R^{(N,M)}(1,a,u^*,b,c,d,1)$ hängt nur von u^* ab und ist damit universell. Die einzigen Träger von Nichtuniversalität in (3.7) sind der triviale Dimensionsfaktor $\mu^{d(N,M)}$ und die Skalenfaktoren E_i^* , die ja die ursprüngliche Kopplung u enthalten. In der Umgebung des multikritischen Punktes $c=0$ gibt es also eine Vierskalenfaktoruniversalität : nach Festlegung einer nicht-universellen, systemabhängigen Skala für jedes der vier relevanten Felder t, c, h, h_1 läßt sich die Korrelationsfunktion durch eine für alle Systeme einer Universalitätsklasse gleiche Funktion ausdrücken.

In der Nähe des gewöhnlichen Obergangs, der für $c>0$ stattfindet, würde man dementsprechend eine Dreiskalenfaktoruniversalität für die drei verbleibenden relevanten Felder t, h und h_1 erwarten. Dies folgt auch

tatsächlich aus (3.7), denn im Limes $t \rightarrow 0$, $c > 0$ muß es ja einen Crossover zu den Exponenten des gewöhnlichen Übergangs geben, d.h., die Skalenfunktion Ξ muß in diesem Grenzwert ein singuläres Verhalten aufweisen :

$$\begin{aligned} \Xi^{(N,M)} & (cE_c^*(tE_t^*)^{-\phi}, hE_h^*(tE_t^*)^{-\Delta}, h_1E_{h_1}^*(tE_t^*)^{-\Delta_1}, x/\epsilon) \\ & \sim (cE_c^*(tE_t^*)^{-\phi})^{My} \Xi_{\infty}^{(N,M)} (hE_h^*(tE_t^*)^{-\Delta}, h_1E_{h_1}^*(cE_c^*)^y (tE_t^*)^{-\Delta_1 - \phi y}, x/\epsilon) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Der zunächst unbekannte Exponent y wird aus der Forderung bestimmt, daß der Exponent der t -Abhängigkeit von $G_R^{(N,M)}$ aus dem multikritischen in den gewöhnlichen übergehen muß, d.h.,

$$\begin{aligned} y &= v(n(N,M) - n_{\text{ord}}(N,M)) / \phi M = v(\eta_1^* - \eta_{1,\text{ord}}^*) / 2\phi \\ &= -(\gamma_{11} - \gamma_{11,\text{ord}}) / 2\phi \end{aligned} \quad (3.9)$$

wobei der Index ord die Größen des gewöhnlichen Übergangs kennzeichnen soll. Die spezielle Kombination von h_1 und c als Argument von Ξ_{∞} in (3.8) ist notwendig wegen der Bedingung $G_R^{(N,M+1)} = \partial / \partial h_1 G_R^{(N,M)}$. Die Skalenform der Korrelationsfunktionen am gewöhnlichen Übergang lautet damit

$$\begin{aligned} G_{R,\text{ord}}^{(N,M)}(t,u,h,h_1,x,u) &= u^{d(N,M)} (tE_t^*)^{v(d(N,M)+n_{\text{ord}}(N,M))} E_h^{*N} E_{h_1,\text{ord}}^{*M} \\ & \Xi_{\infty}^{(N,M)} (hE_h^*(tE_t^*)^{-\Delta}, h_1E_{h_1,\text{ord}}^*(tE_t^*)^{-\Delta_1,\text{ord}}, x/\epsilon) \end{aligned} \quad (3.10)$$

mit

$$E_{h_1, \text{ord}}^* = E_{h_1}^* (cE_c^*)^y$$

und

$$\Delta_{1, \text{ord}} = \Delta_1 + \phi y$$

Sie weist also tatsächlich die vermutete Dreiskalenfaktoruniversalität auf.

Korrelationsfunktionen werden im Experiment nur selten gemessen, insbesondere in der Nähe von Oberflächen (Messung der Zweipunktkorrelationsfunktion durch Glanzwinkelstreuung von Röntgenstrahlen oder Neutronen zur Bestimmung der Oberflächenexponenten wurden vorgeschlagen⁵⁹⁻⁶¹, werden aber wegen der experimentellen Schwierigkeiten erst zaghaft in Angriff genommen⁶²). Einfacher zugängliche Größen sind thermodynamische Variable wie Suszeptibilitäten und Ordnungsparameter. Diese lassen sich als Spezialfälle der oben betrachteten Korrelationsfunktionen darstellen und erben deren universelle Eigenschaften. Die wichtigsten Beziehungen sind

$$m_1(t) = G_R^{(0,1)} = \mu^{d(0,1)} (tE_t^*)^{\beta_1} E_{h_1}^* \Xi_{01} \quad (3.11a)$$

$$\chi_{11}(t) = G_R^{(0,2)}(p=0) = \mu^{d(0,2)} (tE_t^*)^{-\gamma_{11}} E_{h_1}^{*2} \Xi_{02} \quad (3.11b)$$

$$\chi(z) = \int_0^\infty dz' G_R^{(2,0)}(p=0, z, z') = \mu^{d(2,0)} (tE_t^*)^{d(2,0)+n(2,0)} E_h^{*2} \int_0^\infty dz' \Xi_{20}(z/\xi, z'/\xi) \quad (3.11c)$$

$$\chi_1 = \int_0^\infty dz' G_R^{(1,1)}(p=0, z=0, z') = \mu^{d(1,1)} (tE_t^*)^{-\gamma_1} E_h^* E_{h_1}^* \Xi_{11} \quad (3.11d)$$

$$\chi_s = \int_0^\infty dz (\chi(z) - \chi_b) = \mu^{d(2,0)} (tE_t^*)^{-\gamma_s} E_h^{*2} \Xi_s \quad (3.11e)$$

$$m(z) = G_R^{(1,0)}(z) = \mu^{d(1,0)} (tE_t^*)^{d(m)+n(m)} E_h^* \varepsilon_{10}(z/\varepsilon) \quad (3.11f)$$

$$m_s = \int_0^\infty dz(m(z) - m_b) = \mu^{d(m_s)} (tE_t^*)^{\beta_s} E_h^* \varepsilon_{ms} \quad (3.11g)$$

Die nichtuniversellen Skalenfaktoren E_i^* können bei der Division geeigneter Größen wegfallen. So sind die Verhältnisse der Amplituden oberhalb und unterhalb T_c aller Größen universell : für die lokale Oberflächensuszeptibilität $\chi_{11} = \chi_{11}^{(\pm)} t^{-\gamma_{11}}$, $t > 0$ gilt beispielsweise $\chi_{11}^{(+)} / \chi_{11}^{(-)} = \varepsilon_{02}(t=0+)/\varepsilon_{02}(t=0-)$. Aber auch geeignete Kombinationen von Amplituden verschiedener Größen können universell sein. Diese Eigenschaft folgt z.B. aus der Skalenrelation $2\gamma_1 = \gamma_{11} + \gamma_s$ und (3.10) für das Verhältnis

$$\chi_s^{(\pm)} \chi_{11}^{(\pm)} / \chi_1^{(\pm)2} = \varepsilon_s(\pm) \varepsilon_{02}(\pm) / \varepsilon_{11}(\pm)^2 \quad (3.12)$$

Aus weiteren Skalenrelationen folgen die universellen Amplitudenverhältnisse $m_s^{(-)} / m_b^{(-)} \varepsilon^{(-)}$ und $\chi_s^{(\pm)} / \chi_b^{(\pm)} \varepsilon^{(\pm)}$. Alle diese Relationen gelten sowohl für den gewöhnlichen wie auch den multikritischen Übergang, nicht jedoch für Kombinationen zwischen diesen, da die kritischen Exponenten der beiden Übergänge verschieden sind. Eine Ausnahme bildet das Verhältnis $\chi_s^{(\pm)ord} / \chi_s^{(\pm)sp}$ da in beiden Fällen gilt $\gamma_s = \gamma + \nu$.

3.2 ϵ -Entwicklung in der symmetrischen Phase.

Die im vorigen Abschnitt definierten Amplituden der thermodynamischen Größen sollen jetzt in der symmetrischen Phase, also für $T \geq T_c$ in 1.Ordnung in der Kopplungskonstanten u berechnet werden. Da oberhalb T_c der Ordnungsparameter null ist, kann man sich auf die drei Suszeptibilitäten χ_1 , χ_{11} und χ_s beschränken, die auf einfache Weise mit den Zweipunktkorrelationsfunktionen zusammenhängen (vgl.(3.11)). Die diagrammatische Entwicklung der allgemeinen Zweipunktkorrelationsfunktion $G_R(p, z, z')$ ist in Fig.6 gezeigt. Jede Linie stellt den Propagator (2.15) dar. Durch Spezialisierung der Argumente z und z' erhält man daraus die benötigten Größen $G_R^{(N,M)}$.

$$G^{(2)}(p, z, z') = \frac{p}{z} \frac{1}{z'} + \frac{p}{z} \frac{\text{Diagramm: ein Kreis mit einem Punkt in der Mitte}}{p} \frac{1}{p} \frac{1}{z'}$$

Fig.6: Diagrammatische Entwicklung der 2-Punkt-Korrelationsfunktion oberhalb T_c in 1. Ordnung Störungstheorie

Im Prinzip könnte man so vorgehen, daß man die Suszeptibilitäten mit dem c_0 -abhängigen Propagator (2.15) ausrechnet und dann durch Setzen von $c_0=0$ die multikritischen Amplituden und für $c_0>0$ und $t>0$ die gewöhnlichen Amplituden abliest. Das Rechnen mit (2.15) ist jedoch sehr kompliziert. Außerdem sind wir ja nicht an der c -Abhängigkeit der Korrelationsfunktionen interessiert, sondern nur an deren Eigenschaften an den Fixpunkten

$c=0$ bzw. $c=\infty$. Abweichungen von diesen geben nur Korrekturen zum Skalen³⁵. Zumindest am multikritischen Übergang können wir daher von vornherein mit dem von-Neumann-Propagator $G_N = G_0(c_0=0)$ rechnen, da der Limes $c \rightarrow 0$ in den Skalenfunktionen ja unkritisch ist. Beide Verfahren geben die gleichen Resultate.

Entsprechend würde man gern am gewöhnlichen Übergang mit dem Dirichlet Propagator $G_D = G_0(c_0=\infty)$ rechnen. Wegen der Eigenschaft

$$G_D(z,0) = G_D(0,z') = 0 \quad (3.13)$$

ist jedoch $G^{(N,M)} = 0$ für alle $M > 0$. Diese Schwierigkeit kann man umgehen, indem man alle Korrelationsfunktionen in eine Potenzreihe nach c_0^{-1} entwickelt, deren führender Term

$$G^{(N,M)} = c_0^{-M} G_\infty^{(N,M)} + O(c_0^{-(M+1)}) \quad (3.14)$$

ist. $G_\infty^{(N,M)}$ wird mit dem Dirichletpropagator berechnet und enthält statt der Felder $\phi(r,0)$ deren Normalableitungen auf der Oberfläche:

$$G_\infty^{(N,M)}(x,r) = \langle \prod_{i=1}^N \phi(x_i) \prod_{j=1}^M \partial_z \phi(r_j,0) \rangle_{c=\infty} \quad (3.15)$$

Fragen der Renormierung dieser $1/c$ -Entwicklung sind ausführlich in ³⁵ behandelt.

Für unsere Zwecke ist es wichtig festzustellen, daß die Amplituden, die mit der $1/c$ -Entwicklung ausgerechnet werden, im allgemeinen nicht

identisch sind mit denjenigen, die im Grenzwert $c \rightarrow \infty$ aus den c -abhängigen Korrelationsfunktionen folgen. Denn in 3.1 wurde ja gezeigt, daß in diesem Grenzwert $G^{(N,M)}_{\sim(E_{h1}^{\text{ord}})^M}$ mit $E_{h1}^{\text{ord}} = E_{h1}(cE_c)^y$, während in der $1/c$ -Entwicklung gilt $G^{(N,M)}_{\sim(c_0/\mu)^{-M}}$. Der Unterschied besteht also in einer unterschiedlichen Wahl des nichtuniversellen Faktors E_{h1}^{ord} . Da der Faktor sich bei den universellen Verhältnissen kürzt, können diese mit beiden Verfahren berechnet werden, vorausgesetzt, es wird für alle Amplituden das gleiche Verfahren benutzt. Schwierigkeiten gibt es nur bei universellen Verhältnissen, die sowohl Amplituden des gewöhnlichen wie auch des multikritischen Übergangs enthalten. Dann lassen sich die Ergebnisse der $1/c$ -Entwicklung nur benutzen, wenn der Grenzwert der betrachteten Größe für $c \rightarrow \infty$ existiert und von 0 verschieden ist. Bei der uns interessierenden Größe $\chi_s^{(\pm)\text{ord}}/\chi_s^{(\pm)\text{sp}}$ ist dies der Fall.

Alle Ergebnisse, die im folgenden angegeben werden, sind am multikritischen Übergang mit dem von-Neumann-Propagator und am gewöhnlichen Übergang mit dem Dirichlet-Propagator berechnet worden (d.h., $E_{h1}^{\text{ord}} = c_0/\mu$). Dabei wurden die üblichen Methoden der Feldtheorie mit Dimensionsregularisierung benutzt ^{12,13}. Einige Details sind am Beispiel von χ_1 im Anhang von ⁶⁴ aufgezeigt. Die Resultate für den gewöhnlichen Übergang lauten

$$\chi_{11}^{(+)\text{ord}} = - (1 + (n+2)/(n+8) \ 3u/4 \ (3-C_E)) \quad (3.16)$$

$$\chi_1^{(+)\text{ord}} = (1 - (n+2)/(n+8) \ 3u/2 \ (C_E + \pi 3^{-1/2} - 3/2)) \quad (3.17)$$

$$\chi_s^{(+)\text{ord}} = - (1 + (n+2)/(n+8) \ 3u(\ 3(1-C_E)/4 + \pi(1/2 - 3^{-1/2}))) \quad (3.18)$$

Dabei ist $C_E = 0.5772...$ die Eulerkonstante und μ wurde gleich 1 gesetzt.

Am multikritischen Punkt findet man

$$\chi_{11}^{(+)\text{sp}} = 1 + (n+2)/(n+8) \cdot 3u/4 \cdot (5-3C_E) \quad (3.19)$$

$$\chi_1^{(+)\text{sp}} = 1 + (n+2)/(n+8) \cdot 3u \cdot (1-3C_E/4+3^{-1/2}\pi/2) \quad (3.20)$$

$$\chi_s^{(+)\text{sp}} = (n+2)/(n+8) \cdot 3\pi u/2 \quad (3.21)$$

3.3 Ordnungsparameterprofil für gewöhnlichen Übergang

Das auffälligste Merkmal eines halbbunendlichen Systems ist die Ortsabhängigkeit des Ordnungsparameters unterhalb T_c , wie in Fig.4 schematisch skizziert. Sie kann durch Streuung von Licht oder Röntgenstrahlen gemessen werden. In diesem Abschnitt soll das Profil in 1-Loop-Näherung berechnet werden, wobei Fehler in einer früheren Arbeit von Wilson⁶⁵ berichtigt werden. Auch für das Ordnungsparameterprofil läßt sich eine universelle Skalenform angeben :

$$m(z) = m_b \cdot \sigma(z/2\xi) \quad (3.22)$$

Die Funktion $\sigma(x)$ ist nach Wahl einer systemabhängigen Skala für die

Korrelationslänge ξ universell und muß die Randbedingungen

$$\sigma(\infty) = 1 \quad (3.23)$$

und

$$\sigma(0) = 0 \quad (3.24)$$

erfüllen. Die erste Bedingung ist offensichtlich; die zweite folgt aus $\beta_1 > \beta$ (für den gewöhnlichen Übergang), d.h., daraus, daß der Ordnungsparameter in der Oberfläche schneller gegen 0 geht als im Volumen, so daß asymptotisch für $T \rightarrow T_c$ (3.24) gelten muß. Im Rahmen der $1/c$ -Entwicklung wird sie automatisch erfüllt wegen der Eigenschaft (3.13) des Dirichlet-Propagators.

Neben dem theoretischen und experimentellen Interesse am Ordnungsparameterprofil gibt es auch einen rein technischen Grund zu seiner Berechnung : in einer geordneten Phase geht nämlich das Profil in den freien Propagator ein. Für die Korrelationsfunktionen in Ordnung 1-Loop ist auch das Profil bis zu dieser Ordnung nötig, wie wir weiter unten sehen werden.

Die Störungsreihe wird in der geordneten Phase so formuliert, daß man den Ordnungsparameter aufspaltet in seinen Mittelwert und Fluktuationen :

$$\phi = m + \eta \quad (3.25)$$

mit $m = \langle \phi \rangle$ und

$$\langle \eta \rangle = 0 \quad (3.26)$$

Um den Komplikationen durch Goldstonemoden zu entgehen, beschränke ich mich ab jetzt auf einen einkomponentigen Ordnungsparameter ($n=1$). Die Hamiltonfunktion in Abhängigkeit von η lautet dann

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \{ \eta \} = \int d^d x \{ & \frac{1}{2} (\nabla \eta)^2 + -|\tau| m + \frac{g}{6} m^3 - \Delta m + \delta(z) (c m - \partial_z m) \eta + \frac{1}{2} \eta^2 \\ & + \frac{g}{3!} m \eta^3 + \frac{g}{4!} \eta^4 + \delta(z) \frac{g}{2} \eta^2 \} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Die Störungsreihe wird also um einen Einervertex mit dem Gewicht

$-|\tau| m + \frac{g}{6} m^3 - \Delta m + \delta(z) (c m - \partial_z m)$ und einen Dreivertex mit dem Gewicht $\frac{g}{3!} m$ erweitert. In 1-Loop-Näherung heißt die Bedingung (3.26)

$$\begin{aligned} 0 = G^{(1)}(x) = \int dz' G_0(0, z, z') \{ & |\tau| m - \frac{g}{6} m^3 + \Delta m - \delta(z) (c_0 m - \partial_z m) \\ & - \frac{g}{2} m \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} G_0(p', z', z') \} \end{aligned} \quad (3.28)$$

(die entsprechenden Graphen der diagrammatischen Entwicklung zeigt Fig.7).

$$G^{(1)} = \text{---} \bullet + \text{---} \bigcirc$$

Fig.7: Diagrammatische Entwicklung von $G^{(1)}$ in der geordneten Phase

Der Ordnungsparameter kann wegen der Symmetrie des Problems nur von z abhängen und erfüllt nach (3.28) die Differentialgleichung

$$-m'' - |\tau|m + \frac{g}{8}m^3 + \frac{g}{2}m \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} G_0(p', z', z') = 0 \quad (3.29)$$

mit der Randbedingung

$$m'(0) = c_0 m(0) \quad (3.30)$$

Dabei ist $G_0(p, z, z')$ der parallel zur Oberfläche (Impuls p) fourier-transformierte Propagator :

$$G_0(p, z, z') = f(p, z, z') - f(p, z, -z') \quad (3.31)$$

wobei die bzgl. Vertauschung von z und z' symmetrische Funktion f für $z \leftrightarrow z'$ gegeben ist durch

$$f(p, z, z') = \{ \exp(-\omega_p |z - z'|) / 2\omega_p (\omega_p^2 - B^2) (\omega_p^2 - 4B^2) \} \{ (3B^2 \tanh^2 Bz - B^2 + \omega_p^2 + \text{sgn}(z - z') 3\omega_p B \tanh Bz) + (z \leftrightarrow z') \} \quad (3.32)$$

mit den Abkürzungen $B = (|\tau|/2)^{1/2}$ und $\omega_p = p^2 + 4B^2$.

Wenn die Impulsintegration über die "Blase" in (3.29) ausgeführt wird, erhält man bis zur Ordnung ϵ^0

$$Q_0(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^{d-1}}{(2\pi)^{d-1}} G_0(p, z, z) = |\tau| \pi^{-d/2} 2^{-d} \{ \epsilon^{-1} (-4 + 6 \operatorname{sech}^2 y) + 2 C_E^{-2+2 \ln |2\tau|} + (6 - \pi 3^{1/2} - 3 C_E - 3 \ln |2\tau|) \operatorname{sech}^2 y + \pi 3^{1/2} \operatorname{sech}^4 y - \frac{1}{2} J''(y) + 2 J(y) + 6 J'(y) \operatorname{th} y - \frac{9}{2} I''(y) + 12 J(y) \operatorname{th}^2 y + 18 I'(y) \operatorname{th}^3 y - 18 I(y) \operatorname{th}^4 y \}$$

wobei $y = Bz$ und $J(y) = K_0(4y)$ (modifizierte Besselfunktion). Die Funktion $I(y)$ ist definiert durch

$$I(y) = \int_0^\infty dp \exp(-2y(p^2+4)^{1/2}) / (p^2+3)(p^2+4)^{1/2} \quad (3.34)$$

Im Limes $z \rightarrow \infty$ erhält man aus (3.29), (3.33) und (3.34) den Volumenordnungsparameter

$$m_b = (6|\tau|/g)^{1/2} (1+gA) \quad (3.35)$$

mit

$$A = 2^{-d} \pi^{-d/2} (\epsilon^{-1} - (C_E^{-1} + \ln |2\tau|)/2) \quad (3.36)$$

Um die z -abhängige Skalenfunktion $\sigma(z/2\xi)$ zu bekommen, spalten wir diese auf in einen 0-Loop und einen 1-Loop Beitrag :

$$\sigma(z/2\xi) = m_0(z) + g m_1(z) \quad (3.37)$$

$m_0(z) = \operatorname{th} Bz$ ist schon aus früheren Arbeiten²⁶ bekannt. Durch Einsetzen von (3.33) in (3.29) und Vernachlässigung von Gliedern der Ordnung 0(2-Loop) bekommt man für $m_1(z)$ die Differentialgleichung

$$-m_1' + |\tau|(3m_0^2-1)m_1 = -2|\tau|Am_0^3 - \frac{1}{2}m_0Q_0 \quad (3.38)$$

Da die Greensfunktion des Differentialoperators auf der linken Seite gerade der freie Propagator $G_0(0,z,z')$ ist, läßt sich $m_1(z)$ in der kompakten Form

$$m_1(z) = \int_0^\infty dz' G_0(0,z,z') (-2|\tau|Am_0^3 - \frac{1}{2}m_0Q_0) \quad (3.39)$$

angeben. Nach Elimination der Polterme in ϵ durch den Übergang zur renormierten Temperatur und renormierten Kopplungskonstanten u und Exponentiation der $\ln t$ -Terme, schreibt sich das Profil

$$m(z) = m_b \sigma(z) \quad (3.40)$$

mit dem renormierten

$$m_b = m_b^{(-)} |t|^\beta \quad (3.41)$$

wobei

$$m_b^{(-)} = (6/2^\pi)^{d/2} u^* \{1 - \frac{\epsilon}{6} (\ln 2 + C_E - 1)\} \quad (3.42)$$

und

$$\beta = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{6} \quad (3.43)$$

Das Profil ist gegeben durch

$$\sigma(\zeta) = \sigma_0(\zeta) + \epsilon \sigma_1(\zeta) \quad . \quad (3.44)$$

Dabei ist

$$\sigma_0(\zeta) = \text{th} \zeta \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} \sigma_1(\zeta) = \frac{1}{3} \{ \frac{1}{4} (\pi 3^{1/2} - \frac{11}{2}) \zeta \text{sech}^2 \zeta - \pi / 3^{1/2} 2 \text{th} \zeta \text{sech}^2 \zeta \\ + \frac{1}{2} \int_0^\infty dz' R(\zeta') \text{th} \zeta' 2 | \tau | G_0(0, z, z') \} \end{aligned} \quad (3.46)$$

und

$$\begin{aligned} R(\zeta) = 9 \text{th}^2 \zeta (I(\zeta)(1 + \text{th}^2 \zeta) - I'(\zeta) \text{th} \zeta) + 3 K_0(4\zeta)(1 + 5 \text{th}^2 \zeta) \\ + 12 K_1(4\zeta) \text{th} \zeta + \zeta^{-1} K_1(4\zeta) \quad . \end{aligned} \quad (3.47)$$

Die Abkürzung ζ steht für $z/2\xi$, wobei die Korrelationslänge ξ so normiert wurde, daß sie gleich der logarithmischen Ableitung der 2-Punkt-Vertexfunktion der translationsinvarianten ϕ^4 -Theorie nach dem Quadrat des Impulses ist :

$$\xi^{-2} = \partial \ln \Gamma_b^{(2)}(q^2, t) / \partial q^2 |_{q=0} \quad (3.48)$$

Man erhält so $\xi = \xi^{(-)} t^{-\nu}$ mit der Amplitude

$$\xi^{(-)} = 2^{-\nu} (1 - \epsilon (C_E / 12 + \frac{1}{8})) \quad (3.49)$$

und dem üblichen Volumenexponenten

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12} \quad . \quad (3.50)$$

Einen etwas anderen Weg zur Berechnung des Ordnungsparameters schlug Wilson⁶⁵ ein. Abgesehen davon, daß er statt der Dimensionsregularisierung eine Cutoff-Renormierung verwendete, versuchte er, Gleichung (3.38) mit einem Ansatz der Form

$$m_1(z) = 2^{-d+1} \pi^{-d/2} (6|\tau|/g)^{1/2} \quad (3.51)$$

$$(a_1(y)+b(y)thy+c(y)sech^2y+d_1(y)sech^2ythy)$$

direkt zu lösen. Ein Koeffizientenvergleich der Potenzen von thy bis th^5y gibt dann 6 Gleichungen für die 4 unbekannten Funktionen a_1 , b , c , d_1 . Da dieses Gleichungssystem überbestimmt ist, muß nicht notwendigerweise eine Lösung existieren. Tatsächlich ist die Lösung, die Wilson angibt, falsch, wie sich durch eine einfache Probe feststellen läßt. Es läßt sich aber eine Lösung der Form (3.51) finden, wenn man zuläßt, daß $a_1(y)$ auch einen Term proportional zu th^2y enthält. Eine elementare Rechnung zeigt, daß (3.38) mit

$$a_1(y) = \tilde{a}_1(y) - \tilde{a}_1(\infty)th^2y, \quad \tilde{a}_1(y) = \int_0^y dy' (4I(y') + J(y') + 3H(y')) \quad (3.52a)$$

$$b(y) = (2\epsilon)^{-1} - (C_E - 1 + \ln|2\tau|)/4 + b_1(y) \quad (3.52b)$$

$$b_1(y) = -(15I(y) + J(y) + 18H(y))/4 \quad (3.52c)$$

$$c(y) = y(C_E + 3/2 + \ln|2\tau| - 2/\epsilon)/8 + c_1(y) \quad (3.52d)$$

$$c_1(y) = -\int_0^y dy' (18I(y') + 5J(y') + 9H(y'))/2 + y(\pi 3^{1/2} - 11/2)/8 \quad (3.52e)$$

$$d_1(y) = 3/2 I(y) - (\pi/12)3^{1/2} \quad (3.52f)$$

und

$$H(y) = \int_0^\infty dp (p^2 + 3)^{-2} (p^2 + 4)^{-1/2} \exp(-2y(p^2 + 4)^{1/2}) \quad (3.53)$$

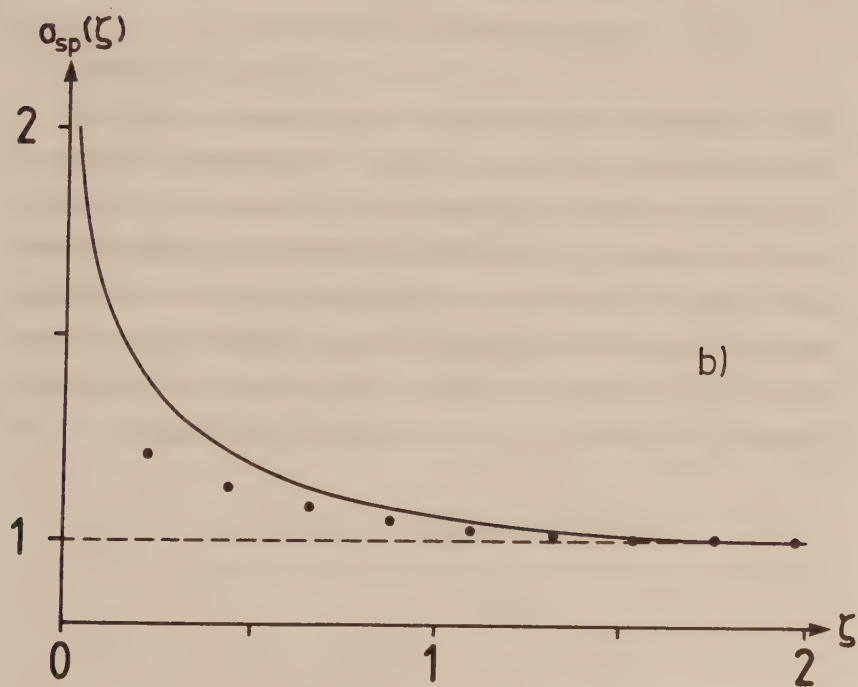
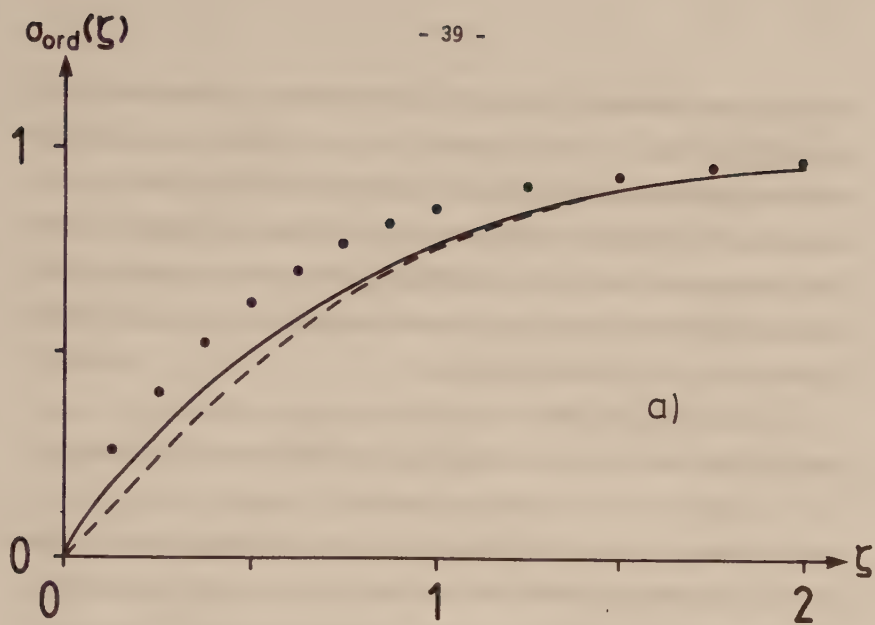
eine Lösung der Differentialgleichung (3.38) ist. Wilson's Funktion unterscheidet sich von (3.52a) durch den Term $(1-e^{-2y})$ anstelle von $th^2 y$ in $a_1(y)$. Es ist ohne weiteres Rechnen klar, daß sich dieser Term in (3.38) nicht wegheben kann. Ein weiterer Fehler steckt in der Berechnung von $Q_0(y)$ durch Wilson (Glg.A.2). Dort muß es heißen $1-2 \ln(\Lambda/B)$ statt $-2\ln\Lambda/B$. Die Konstante 1 geht zwar nicht in die Exponenten, wohl aber in die Amplitude ein.

Nach Ersetzen der nackten durch die renormierten Größen heben sich die Polterme in ϵ weg und das Profil läßt sich wieder in der Form (3.40) schreiben, wobei diesmal $\sigma_1(\zeta)$ expliziter gegeben ist durch

$$\sigma_1(\zeta) = 2/3 (a_1(\zeta)+b_1(\zeta)th\zeta+c_1(\zeta)sech^2\zeta+d_1(\zeta)th\zeta sech^2\zeta) \quad (3.54)$$

Ein numerischer Vergleich der beiden Funktionen (3.46) und (3.54) zeigt, daß sie identisch sind. Das renormierte Profil ist zusammen mit der Molekularfeldlösung und den Monte-Carlo-Daten von Binder und Landau⁶⁹ in Fig.8a gezeigt. Im Bereich $\zeta < 1$ wurden dabei die Terme in (3.54), die im Limes $\zeta \rightarrow 0$ proportional zu $\ln \zeta$ sind, in der Form ζ^a mit $a=(B_1-B)/\nu=1-\epsilon/6+O(\epsilon^2)$ exponentiiert. Dieses Verhalten der Skalenfunktion ist notwendig, um den

Fig.8: Universelle Ordnungsparameterprofile a) gewöhnlicher Übergang
b) besonderer Übergang. Die durchgezogenen bzw. unterbrochenen Linien sind die Ergebnisse der ϵ -Entwicklung bzw. der Molekularfeldnäherung. Die Punkte entstammen der Monte-Carlo-Simulation von Binder und Landau⁶⁹.



Obergang vom Exponenten β im Volumen zum Exponenten β_1 in der Oberfläche zu bewerkstelligen. Da der 2-Loop-Wert von a noch einmal eine wesentliche Änderung gegenüber dem 1-Loop-Ergebnis bedeutet (0,73 bzw. 0.83 für $\epsilon=1$) würde eine 2-Loop-Berechnung des Profils sicherlich noch einmal eine deutliche Verbesserung des Resultats erbringen. Verglichen mit dem Profil in Molekularfeldnäherung stellt jedoch auch das 1-Loop-Ergebnis eine deutliche Annäherung an die Monte-Carlo-Kurve dar.

Zur Berechnung des Profils am multikritischen Punkt müssen die gleichen Schritte durchlaufen werden wie eben für den gewöhnlichen Obergang. Da in diesem Fall der 0-Loop-Beitrag zum Profil konstant ist ($\sigma_0(\zeta)=1$), ist die Rechnung wesentlich einfacher, denn der Propagator nimmt dann auch für $T < T_c$ die einfache Form (2.15) an. Diehl und Dietrich²⁸ fanden

$$\sigma(\zeta) = 1 + \epsilon/6 \{ J(\zeta) - 3I(\zeta) + 3^{1/2} \pi/2 \exp(-2\zeta) \} \quad (3.55)$$

Der Vollständigkeit wegen ist dieses Resultat zusammen mit der Molekularfeldlösung und den Monte-Carlo-Daten in Fig.8b gezeigt. Die Übereinstimmung ist hier besser als am gewöhnlichen Obergang, da die 2-Loop-Korrektur zum Exponenten $a = -\epsilon/6 - \epsilon^2/162$ unwesentlich ist. Im Gegensatz zum gewöhnlichen Obergang muß hier die Skalenfunktion $\sigma(\zeta)$ die Randbedingung $\sigma(\zeta) \rightarrow \infty$ für $\zeta \rightarrow 0$ erfüllen, da $\beta_1 < \beta$. Ein solches Verhalten läßt sich aus den Monte-Carlo-Simulationen natürlich nur schwer extrapolieren, so daß deren Ergebnisse für kleine ζ mit Vorsicht betrachtet werden müssen.

3.4 ϵ -Entwicklung in der geordneten Phase.

Die Kenntnis des Profils erlaubt es, die Zweipunktkorrelationsfunktion und damit die verschiedenen Suszeptibilitäten unterhalb T_c zu berechnen. In der geordneten Phase hängt nämlich der Propagator $G(p, z, z')$ in funktionaler Weise vom Ordnungsparameter ab. G erfüllt die Differentialgleichung

$$(-d^2/dz^2 + p^2 - |\tau| + g/2 m^2)G(p, z, z') = \delta(z - z') \quad (3.56)$$

mit der Randbedingung $\frac{\partial}{\partial z} G(p, z, z')|_{z=0} = \frac{\partial}{\partial z'} G(p, z, z')|_{z'=0} = 0$ für den gewöhnlichen bzw. $G(p, 0, z') = G(p, z, 0) = 0$ für den multikritischen Übergang. Spaltet man alle Größen in 0-Loop und 1-Loop Beiträge auf :

$$G(p, z, z') = G_0(p, z, z') + G_1(p, z, z') \quad (3.57)$$

$$m(z) = m_0(z) + m_1(z)$$

erhält man für G_1 die Differentialgleichung

$$(-d^2/dz^2 + p^2 - |\tau| + g/2 m_0^2)G_1(p, z, z') = -g m_0 m_1 G_0(p, z, z') \quad (3.58)$$

mit der Lösung

$$G_1(p, z, z') = -g \int_0^\infty dz_1 m_0(z_1) m_1(z_1) G_0(p, z, z_1) G_0(p, z_1, z') \quad (3.59)$$

da $G_0(p, z, z')$ wiederum die Greensfunktion des Differentialoperators auf der linken Seite von (3.58) ist. G_0 , m_0 und m_1 sind aber schon aus 3.3 bekannt, so daß G_1 damit gegeben ist. Um Terme höherer Ordnung in der Störungsreihe zu bestimmen, müßte dieser iterative Wechsel zwischen Berechnung von Ordnungsparameter und Propagator fortgesetzt werden.

$$G^{(2)}(p, z, z') = \frac{1}{z} \frac{1}{p} \frac{1}{z'} + \frac{1}{z} \frac{\text{circle}}{z'} + \frac{1}{z} \frac{\text{circle}}{z'}$$

Fig.9: Diagrammatische Entwicklung der Zweipunktkorrelationsfunktion unterhalb T_c

Die diagrammatische Entwicklung der allgemeinen Zweipunktkorrelationsfunktion $G^{(2)}(p, z, z')$, die in Fig.9 dargestellt ist, schreibt sich mit Hilfe von (3.59) in analytischer Form als

$$\begin{aligned} G^{(2)}(p, z, z') &= G_0(p, z, z') + G_1(p, z, z') \\ &- g/2 \int_0^\infty dz_1 G_0(p, z, z_1) Q_0(z_1) G_0(p, z_1, z') \\ &+ g^2/2 \int_0^\infty dz_1 \int_0^\infty dz_2 G_0(p, z, z_1) G_0(p, z_2, z') m_0(z_1) m_0(z_2) \\ &(2\pi)^{1-d} \int d^{d-1} p_1 G_0(p_1, z_1, z_2) G_0(p_1 - p, z_1, z_2) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Wie in der symmetrischen Phase erhält man daraus wieder durch Spezi-
 al-

sieren der z-Argumente (und eventuelle Integrationen über diese) im Limes $p \rightarrow 0$ die gewünschten Suszeptibilitäten. Wegen der komplizierten Form der Funktionen $G_0(p, z, z')$ und $m_1(z)$ ist es jedoch erheblich schwieriger, die Polterme zu erkennen und die verbleibenden Amplituden zu berechnen. Dabei ist es eine kleine Hilfe, eventuelle z-Integrationen, wie bei x_1 und x_s , zuerst durchzuführen. Nach Isolation der Polterme können diese dann wieder durch die Z-Faktoren (2.17) entfernt werden. Die Amplituden der Suszeptibilitäten können dann explizit in analytischer Form angegeben werden, wobei allerdings mehrdimensionale Integrale vorkommen, die numerisch berechnet werden müssen. Da der eben skizzierte Weg lediglich mühselige Rechnungen enthält, aber keine neuen Techniken verwendet, beschränke ich mich darauf, die Ergebnisse anzugeben :

$$x_s^{(-)ord} = 3 \cdot 2^{-5/2} (1 + 0.531 u) \quad (3.61a)$$

$$x_1^{(-)ord} = 2^{1/2} (1 - 0.777 u) \quad (3.61b)$$

$$x_{11}^{(-)ord} = -0.962 u \quad (3.61c)$$

$$x_s^{(-)sp} = -u\pi/(8\sqrt{2}) \quad (3.62a)$$

$$x_1^{(-)sp} = 0.5 (1 - 1.296 u) \quad (3.62b)$$

$$x_{11}^{(-)sp} = 2^{-1/2} (1 - 0.882 u) \quad (3.62c)$$

Eine ausführliche Berechnung von x_1 ist im Anhang von ⁶⁴ als Beispiel angegeben.

Schließlich seien noch die Amplituden der Überschußmagnetisierung m_s (vgl.(2.12)) angegeben, die man aus der Integration der Ordnungsparameterprofile gewinnt:

$$m_s^{(-)ord} = -(3/2 d_\pi d/2u)^{1/2} 2 \ln 2 (1 - 0.96 u) \quad (3.63)$$

$$m_s^{(-)sp} = (3/2 d_\pi d/2u)^{1/2} u\pi/2 \quad (3.64)$$

3.5 Universelle Amplitudenverhältnisse

Die in den Abschnitten 3.2 - 3.4 berechneten Amplituden sollen jetzt dazu verwendet werden, die in 3.1 als universell erkannten Amplitudenverhältnisse anzugeben. Betrachten wir zunächst die Verhältnisse der Amplituden einfacher Größen oberhalb und unterhalb T_c für den gewöhnlichen Übergang:

$$(x_s^{(+)} / x_s^{(-)})^{ord} = -4\sqrt{2}/3 (1 - 0.15\epsilon) \quad (3.65a)$$

$$(x_1^{(+)} / x_1^{(-)})^{ord} = 1/\sqrt{2} (1 + 0.11\epsilon) \quad (3.65b)$$

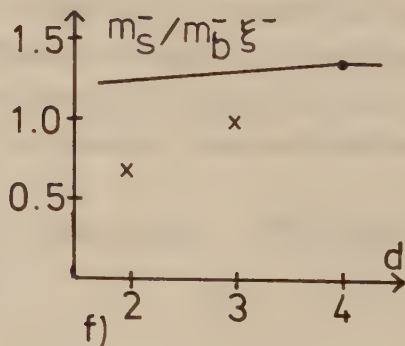
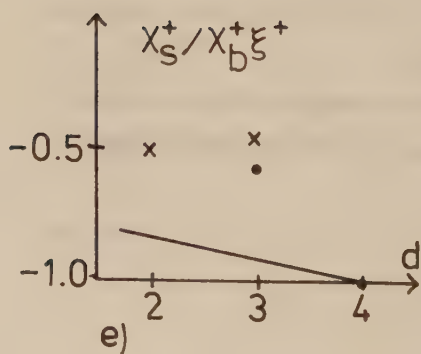
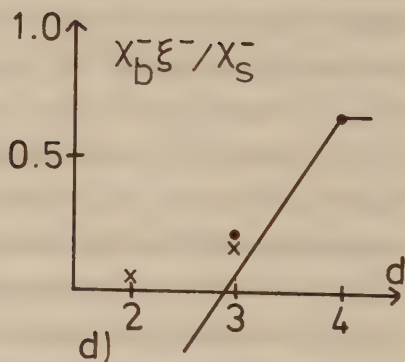
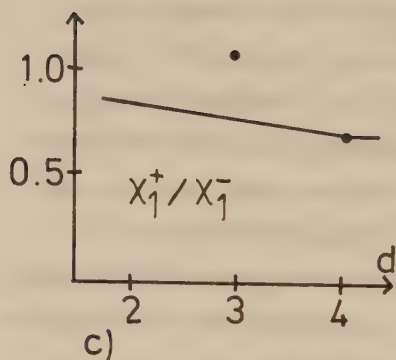
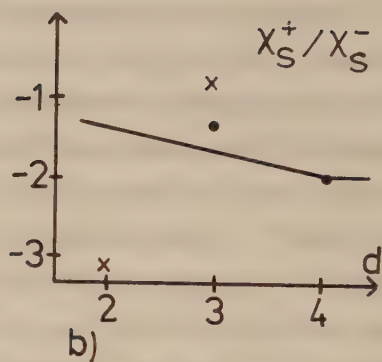
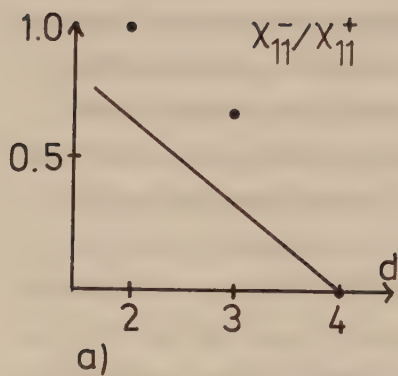
$$(x_{11}^{(+)} / x_{11}^{(-)})^{ord} = 3.1 \epsilon^{-1} \quad (3.65c)$$

Da bisher keines dieser Verhältnisse experimentell bestimmt werden konnte, bleiben für den Vergleich nur exakte Resultate des zweidimensionalen Isingmodells und Monte-Carlo-Ergebnisse. Fig.10a zeigt einen solchen Vergleich für die lokale Oberflächenssuszeptibilität χ_{11} (3.65c) mit einem exakten Ergebnis von McCoy und Wu⁷¹ und einer MC-Simulation von Kikuchi und Okabe⁶⁶. Die Übereinstimmung liegt im Rahmen dessen, was man von einer 1-Loop Approximation erwarten würde. Selbst für $\epsilon=2$ ist der Abstand vom exakten Resultat nicht sehr groß, was aber sicherlich ein Zufall ist. Dies zeigt Fig.10b, wo das Verhältnis der Amplituden der Oberschußsuszeptibilität aufgetragen ist. Die Punkte repräsentieren das Ergebnis der Monte-Carlo-Simulation von Landau⁶⁸ und von Kikuchi, Okabe und Ohno⁶⁷ (Man beachte, daß Landau für $T>T_c$ das falsche Vorzeichen für χ_s angibt; daß χ_s dort negativ ist, läßt sich leicht aus seinen Daten herauslesen). Der für $d=3$ näher an der theoretischen Geraden liegende Wert entstammt der Simulation der Japaner. Die große Abweichung vom Landau'schen Wert gibt eine Abschätzung für die Fehlerbalken der Monte-Carlo-Simulation.

Während in drei Dimensionen eine Verbesserung gegenüber Molekularfeldapproximation eintritt, ist für $d=2$ das Gegenteil der Fall. Die 1-Loop-Entwicklung kann nur den asymptotischen Verlauf der Kurve für $d \rightarrow 4$ exakt beschreiben. Ebenfalls eine leichte Verbesserung gegenüber Molekularfeld ist das Verhältnis der Amplituden von χ_1 (Fig.10c). Der Punkt stammt aus der Simulation von Kikuchi und Okabe⁶⁶.

Noch kein Vergleich mit anderen Daten ist möglich für das Verhältnis der Amplituden von χ_s am gewöhnlichen und am multikritischen Übergang :

$$\chi_s^{(+)\text{ord}} / \chi_s^{(+)\text{sp}} = -\{(n+2)/(n+8) \epsilon \pi/2\}^{-1} \quad (3.66a)$$



$$x_s^{(-)ord}/x_s^{(-)sp} = -5.8\epsilon^{-1} \quad (3.66b)$$

Dagegen können die MC-Daten von Landau⁶⁸ und Binder und Landau⁶⁹ zum Testen einiger gemischter Volumen- und Oberflächengrößen herangezogen werden. Landau findet für die Oberschuß- und die Volumenmagnetisierung $m_{s,ord}^{(-)} = 0.15 \pm 0.01$ und $m_b^{(-)} = 1.2$ in $d=2$ und $m_{s,ord}^{(-)} = 0.38 \pm 0.03$ und $m_b^{(-)} = 1.57$ in $d=3$. Zusammen mit den durch Reihenentwicklung gewonnenen Werten $\xi^{(-)} = 0.176 \pm 0.005$ ($d=2$) und $\xi^{(-)} = 0.244 \pm 0.01$ ($d=3$) von Tarko und Fisher⁷⁰ erlauben sie die Berechnung der universellen Verhältnisse $m_{s,ord}^{(-)}/m_b^{(-)}\xi^{(-)} = 0.71$ ($d=2$) bzw. 1.0 ($d=3$). Die ϵ -Entwicklung gibt hierfür nach numerischer Integration des Profils (3.40) mit Hilfe der Ausdrücke (3.42) und (3.49) für $m_b^{(-)}$ und $\xi^{(-)}$ die Gleichung

$$m_{s,ord}^{(-)}/m_b^{(-)}\xi^{(-)} = -2\ln 2 (1 - 0.05\epsilon) \quad (3.67)$$

Der Vergleich (Fig.10f) fällt ähnlich aus wie für die Suszeptibilität x_s . Eine letzte Möglichkeit zum Vergleich besteht für die Verhältnisse

$$x_s^{(+ord)}/x_b^{(+)}\xi^{(+)} = -1 + \pi(n+2)/(n+8) (1/\sqrt{3} - 1/2)\epsilon \quad (3.68a)$$

$$x_s^{(-)ord}/x_b^{(-)}\xi^{(-)} = 3/2 (1 + 0.94\epsilon) \quad (3.68b)$$

Fig.10: Vergleich der ϵ -Entwicklung mit einem exakten Ergebnis⁷¹ ($x_{11,d=2}$), den Monte-Carlo-Daten der japanischen Gruppe^{66,67} (alle übrigen Punkte) und von Landau⁶⁸ (Kreuze)

Die Amplituden $\epsilon^{(\pm)}$ ($d=2,3$) und $x_b^{(\pm)}$ ($d=3$) können wieder bei Tarko und Fisher⁷⁰ gefunden werden, während $x_b^{(+)} = 0.963$ und $x_b^{(-)} = 0.026$ in zwei Dimensionen exakt bekannt sind⁷². Die Übereinstimmung unterhalb T_c ist recht gut (Fig.10d,e).

Ganz grob kann man feststellen, daß die 1-Loop-Ergebnisse gegenüber Molekularfeldnäherung eine etwa 50%ige Verbesserung bedeuten. Dies ist etwas schlechter als die entsprechenden Ergebnisse im unendlichen System²², woraus man schließen kann, daß Fluktuationen für die Oberflächengrößen eine wichtigere Rolle spielen als für die Volumengrößen. Salopp gesprochen ist man in der Oberfläche weiter von der oberen Grenzdimension 4 (oberhalb der Molekularfeldtheorie exakt wird) entfernt als im Volumen, so daß höhere Terme in der ϵ -Entwicklung wichtiger werden. Zum Abschluß dieses Kapitels möchte ich noch diejenigen Amplitudenverhältnisse angeben, für die noch kein Vergleich mit anderen Daten möglich ist :

$$(x_s^{(+)} / x_s^{(-)})^{sp} = -4\sqrt{2} + 0(\epsilon) \quad (3.69a)$$

$$(x_1^{(+)} / x_1^{(-)})^{sp} = 2 (1 + 0.92\epsilon) \quad (3.69b)$$

$$(x_{11}^{(+)} / x_{11}^{(-)})^{sp} = \sqrt{2} (1 + 0.56\epsilon) \quad (3.69c)$$

$$(x_s^{(+)} x_{11}^{(+)} / x_1^{(+2)})^{ord} = 1 + \epsilon \pi(n+2)/2(n+8) \quad (3.69d)$$

$$(x_s^{(-)} x_{11}^{(-)} / x_1^{(-2)})^{ord} = -0.09 \epsilon \quad (3.69e)$$

$$(\chi_s^{(+)} \chi_{11}^{(+)} / \chi_1^{(+2)})^{sp} = \epsilon \pi (n+2) / 2 (n+8) \quad (3.69f)$$

$$(\chi_s^{(-)} \chi_{11}^{(-)} / \chi_1^{(-2)})^{sp} = -0.25 \epsilon \quad (3.69g)$$

$$m_s^{(-)sp} / m_b^{(-)} \xi^{(-)} = \epsilon \pi / 6 \quad (3.69h)$$

$$\chi_s^{(+)} sp / \chi_b^{(+)} \xi^{(+)} = \epsilon \pi (n+2) / 2 (n+8) \quad (3.69i)$$

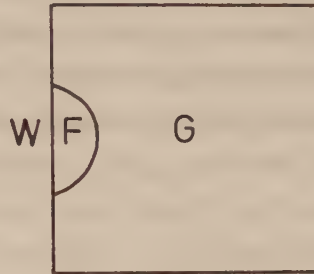
$$\chi_s^{(-)} sp / \chi_b^{(-)} \xi^{(-)} = \epsilon \pi / 12 \quad (3.69j)$$

4.1 Benetzungsübergänge

Die bisherigen Kapitel beschäftigten sich ausschließlich mit den Auswirkungen einer Oberfläche auf Phasenübergänge 2. Ordnung. Tatsächlich stehen kontinuierliche Phasenübergänge wegen der an ihnen zu beobachtenden Fülle von universellen Eigenschaften seit langem im Zentrum der Aufmerksamkeit sowohl der Theorie wie des Experiments. Zu Phasenübergängen 1. Ordnung dagegen lassen sich keine derartigen quantitativ universellen Vorhersagen bzgl. ihrer Diskontinuitäten treffen. Zudem sind die diskontinuierlichen Phasenübergänge weit weniger verstanden als die kritischen Phänomene. So ist es nicht verwunderlich, daß sich bis vor kurzem kaum jemand mit dem Einfluß von Oberflächen auf sie beschäftigt hat. Das änderte sich, als offenbar wurde, daß auch Systeme mit einem Phasenübergang 1. Ordnung in der Nähe von Oberflächen kritisches Verhalten aufweisen können⁷³⁻⁸⁵, d.h., in der Nähe eines solchen Phasenübergangs nimmt die Oberflächen-Freie Energie wieder Skalenform an und es lassen sich universelle Oberflächenexponenten definieren, obwohl es keine entsprechenden Volumenexponenten gibt. Diese kritischen Phänomene kommen dadurch zustande, daß sich eine Grenzfläche zwischen zwei koexistierenden Phasen bei Annäherung an den Phasenübergang 1. Ordnung von der Oberfläche entfernt. Die Fluktuationen dieser Phasengrenzfläche wachsen mit der Entfernung von der Oberfläche an und bewirken das kritische Verhalten in der Oberflächenschicht. Solche Phänomene kann man daher zusammenfassen unter dem Namen Grenzflächendelokalisierungsübergänge. Auch die Bezeichnung oberflächen-

induzierte (Un-)Ordnung wurde vorgeschlagen ⁷³⁻⁷⁶. Ein dritter Name schließlich - Benetzungsübergang - stammt von Cahn⁹⁷. Wie wir noch sehen werden, unterliegt allen diesen Phänomenen der gleiche Mechanismus, so daß ich im weiteren die Begriffe synonym verwenden werde.

Fig.11: Nichtbenetzender Flüssig-
keitstropfen an einer
Wand



Cahn stellte sich die Frage, welchen Einfluß die Wände eines Behälters auf ein Gas ausüben, das sich in der Nähe der Koexistenz zur Flüssigkeit befindet (vgl. Fig.11). Damit ein Flüssigkeitstropfen, der an der Wand haftet, einen endlichen Kontaktwinkel mit ihr bildet (also nicht auseinanderläuft), müssen die Oberflächenspannungen zwischen den Komponenten Wand (W), Flüssigkeit (F) und Gas (G) die Ungleichung

$$\sigma_{GF} > \sigma_{GW} - \sigma_{FW} \quad (4.1)$$

erfüllen. Wenn man sich nun auf der Koexistenzlinie (die durch das chemische Potential $\mu^*(T)$ beschrieben werden soll) der kritischen Temperatur T_c nähert, verschwindet die Oberflächenspannung σ_{GF} schneller als die

Differenz $\sigma_{GW} - \sigma_{FW}$, wie Cahn fand. Das bedeutet, daß es eine Temperatur $T_W < T_C$ geben muß, oberhalb der die Flüssigkeit die Wand makroskopisch dick benetzt. Bei Annäherung an die Koexistenzlinie $\mu \rightarrow \mu^*$ muß daher für $T > T_W$ ein zunächst mikroskopischer Flüssigkeitsfilm auf der Wand unbegrenzt wachsen. Dieses Phänomen nennt man vollständige Benetzung (engl. complete wetting). Nähert man sich dagegen auf der Koexistenzlinie $\mu^*(T)$ von unten der Temperatur T_W , spricht man von kritischer Benetzung (critical wetting), wenn die Flüssigkeitsschicht kontinuierlich wächst, bzw. Benetzung 1. Ordnung (1st order wetting), wenn dies sprunghaft geschieht. Im letzteren Fall muß es aus T_W heraus einen Fortsatz geben, die sogenannte Prewetting-Linie (Fig.12), auf der die Dicke der benetzenden Schicht einen endlichen Sprung macht. Diese Linie endet ihrerseits in einem kritischen Punkt.

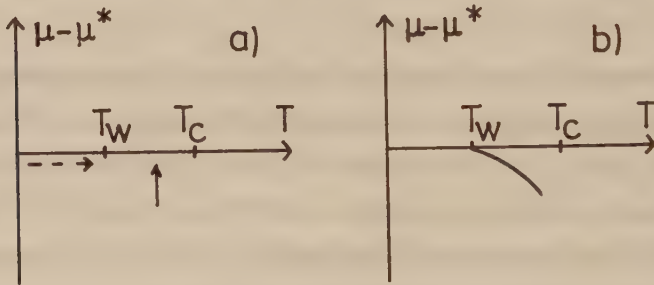


Fig.12: Phasendiagramm eines Fluidums mit a) kritischer b) diskontinuierlicher Benetzung. Die Pfeile bezeichnen die Richtungen für kritische (durchbrochen) und vollständige Benetzung.

Wenn die molekularen Wechselwirkungen derart sind, daß die Wand nicht die Flüssigkeit, sondern das Gas bevorzugt, ereignen sich die

geschilderten Phänomene für $\mu > \mu^*$ in symmetrischer Weise. Man spricht dann von "drying" statt von wetting. Natürlich kann ein gegebenes physikalisches System immer nur drying oder wetting aufweisen, niemals beide zusammen.

Die geschilderten Phänomene sind keineswegs nur auf das System Gas-Flüssigkeit beschränkt. Sie wurden beobachtet in binären Mischungen⁹⁸ und Legierungen^{99,100}, bei denen die Wand eine der Komponenten bevorzugt und beim Oberflächenschmelzen von Blei¹⁰¹. Auch Magnete und Supraleiter können derartige Phasenübergänge aufweisen, wie wir noch sehen werden.

4.2 Molekularfeldtherorie für Benetzungsübergänge

Um Phasenübergänge 1. Ordnung in halbinendlichen Systemen zu beschreiben, muß die Kontinuums-Hamiltonfunktion (2.4) nur leicht abgeändert werden. Ich verwende im folgenden die allgemeine Form

$$\mathcal{H}(\phi) = \int_V d^d x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + f(\phi) \right\} + \int d^{d-1} x f_1(\phi) , \quad (4.2)$$

wobei der Oberflächenterm $f_1(\phi) = \frac{c}{2} \phi^2 - h_1 \phi$ bleibt wie in (2.4) und die "potentielle Energie"

$$f(\phi) = \frac{r}{2} \phi^2 - \frac{b}{x} \phi^x + \frac{g}{y} \phi^y - h \phi \quad (4.3)$$

so gewählt ist, daß sich im Volumen ein Phasenübergang 1. Ordnung ergibt.

Zwei Modelle werden betrachtet : $(x,y) = (3,4)$ ist passend für Systeme, deren Symmetrieeigenschaften einen kubischen Term nicht ausschließen, z.B. einige Pottsmodelle und strukturelle Phasenübergänge. Wenn dies nicht möglich ist, wie in Magneten, wird ein Phasenübergang 1. Ordnung erreicht durch die Wahl $(x,y) = (4,6)$. Dieses Modell hat dann für $b=0$ einen trikritischen Phasenübergang, der auch im halbbunendlichen System bis zur Ordnung ϵ^2 ($\epsilon=3-d$) mit feldtheoretischer Renormierung analog zu Kap.3 ausführlich untersucht ist⁸⁶. Für $b>0$, was im folgenden angenommen wird, ist der Phasenübergang dagegen von 1. Ordnung. Für $h=h_1=0$, worauf ich mich beschränken werde, springt bei der Temperatur

$$\tau^* = \begin{cases} 2b^2/9g & (3,4) \\ 3b^2/16g & (4,6) \end{cases} \quad (4.5)$$

der Ordnungsparameter im Volumen m_b von dem Wert 0 in der ungeordneten Phase ($\tau > \tau^*$) auf den Wert

$$m_b^* = \begin{cases} 2b/3g & (3,4) \\ 3b/4g & (4,6) \end{cases} \quad (4.6)$$

In der geordneten Phase ($\tau < \tau^*$) ist der Volumen-Ordnungsparameter nur schwach temperaturabhängig :

$$m_b = \begin{cases} \frac{1}{2g} (b + (b^2 - 4\tau g)^{1/2}) & (3,4) \\ \frac{1}{2g} \{ (b + (b^2 - 4\tau g)^{1/2})^{1/2} \} & (4,6) \end{cases} \quad (4.7)$$

Was ändert nun die Oberfläche an diesem Verhalten ? Die Antwort auf diese Frage soll jetzt im Rahmen der Molekularfeldapproximation gegeben werden. In dieser Näherung werden Fluktuationen des Ordnungsparameters vernachlässigt und nur der wahrscheinlichste Wert berücksichtigt. Nach (4.2) ist somit die Freie Energie gegeben durch

$$F = \mathcal{H} \{m\} \quad (4.8)$$

wobei $m(z)$ durch Variation bestimmt wird als $\min_{\{\phi\}} \mathcal{H} \{\phi\}$:

$$- m''(z) + \partial f / \partial \phi(m) = 0 \quad (4.9a)$$

$$m'(0) = c m(0) \quad (4.9b)$$

Der "Energieerhaltungssatz" erlaubt die Vereinfachung auf eine Differentialgleichung 1. Ordnung :

$$m'(z) = \pm [2 f(m) - 2 f(m_b)]^{1/2} \quad \text{für } m_1 > m_b \quad (4.10)$$

Mit der Randbedingung (4.9b) folgt daraus für den Oberflächenordnungsparameter m_1 die algebraische Gleichung

$$c m_1 = \pm [2 f(m_1) - 2 f(m_b)]^{1/2}, \quad m_1 > m_b \quad (4.11)$$

Diese Gleichung, und damit auch (4.10), hat im allgemeinen mehrere Lö-

sungen, die sich bezgl. ihrer Oberflächen-Freien-Energien

$$f_s = \frac{c}{2} m_1^2 + \int_0^{\infty} dz m'^2(z) \quad (4.12)$$

unterscheiden. f_s ist der oberflächenproportionale Anteil der Freien Energie (4.8). (Der volumenproportionale Anteil ist natürlich für alle Lösungen von (4.10) und (4.11) gleich.) Die physikalisch stabile Lösung ist daher diejenige mit der kleinsten Oberflächenenergie f_s .

Mit diesen Überlegungen erhält man das in Fig.13 gezeigte Phasendiagramm, das sehr stark an dasjenige für halbbunendliche Systeme mit einem kontinuierlichen Phasenübergang erinnert (Fig.5). Für $c \approx c^* = \sqrt{\tau^*}$ hat der Ordnungsparameter das in Fig. 14a dargestellte Profil. Wie es für Benetzungsphänomene typisch ist, schiebt sich eine nahezu ungeordnete Schicht der Ausdehnung λ zwischen die Oberfläche und das geordnete Volumen. Die analytische Lösung der Differentialgleichung (4.9) für $t < 0$ und $c > 0$ lautet

$$m(z) = m_b - 2\{\xi^2 [Q + \sqrt{R \operatorname{sh}((\pm z + z_0)/\xi)}]\}^{-1} \quad (4.13a)$$

mit

$$\xi^{-1} = b m_b - 2\tau \quad (4.13b)$$

$$Q = g(2 m_b - m_b^*) \quad (4.13c)$$

$$R = 2 b g / 3 (m_b - m_b^*) \quad (4.13d)$$

$$z_0 = \xi \operatorname{Arsh} \{(2 \xi^{-2} / (m_b - m_1) - Q) / R^{1/2}\} \quad (4.13e)$$

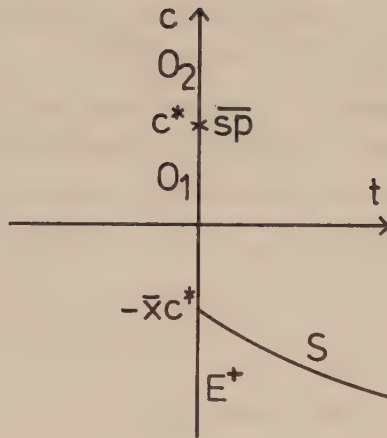


Fig.13: Phasendiagramm der Hamiltonfunktion (4.2)

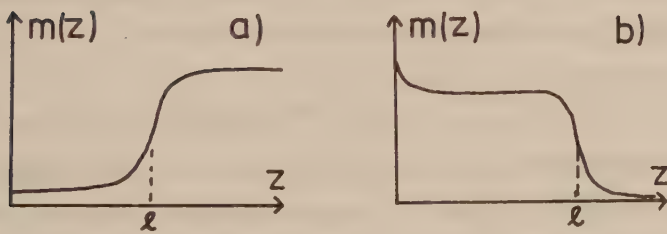


Fig.14: Ordnungsparameterprofile in der Nähe der Übergänge

a) $0_2, \bar{s}p$ b) E^+

für den Fall (3,4) und

$$m(z) = m_b \{ R / [m_b^2/2 + Q F^2((z+z_0)/\xi)] \}^{1/2} \quad (4.14a)$$

mit

$$\xi^{-2} = \frac{1}{2} b m_b^2 - \tau \quad (4.14b)$$

$$Q = \frac{3}{2} m_b^2 - m_b^{*2} \quad (4.14c)$$

$$R = m_b^2 - m_b^{*2} \quad (4.14d)$$

$$z_0 = \xi F^{-1} \{ [(1+2R/m_b^2)/(1+2R/m_b^{*2})]^{1/2} \} \quad (4.14e)$$

für den Fall (4,6) mit $F=\text{cth}$ für $c>0$ bzw. $F=\text{th}$ für $c<0$. Die Länge ℓ , die sich präzise definieren läßt als Wendepunkt des Profils $m(z)$, divergiert bei Annäherung an $t=0$ -. Gleichzeitig verschwindet der Ordnungsparameter in der Oberfläche. Der zugehörige Phasenübergang trägt die Bezeichnung O_2 für $c>c^*$ in Anlehnung an die Notation, die für Phasenübergänge 2. Ordnung in halbinendlichen Systemen üblich ist. Für $c=c^*$ gibt es analog zu diesen einen multikritischen Übergang mit geänderten Exponenten, der in Fig.13 mit $\bar{s}_p$ bezeichnet ist.

In dem Bereich $-\bar{x} c^* < c < c^*$ (mit $\bar{x}=2^{1/3}-1$ (3,4) bzw. $2^{1/2}-1$ (4,6)) ist der Ordnungsparameter in der Oberfläche für $c>0$ nicht mehr so stark unterdrückt, daß eine Schicht der ungeordneten Phase vorteilhaft wäre. Für $c<0$ andererseits sind die Kopplungen in der Oberfläche noch nicht stark genug, um für $t>0$ eine vom Volumen unabhängige Oberflächenordnung durchzusetzen. Bei $t=0$ springt das Profil zusammen mit dem Volumenordnungspara-

meter auf 0; der Phasenübergang mit der Bezeichnung O_1 ist also auch in der Oberfläche diskontinuierlich und es lassen sich keine kritischen Exponenten definieren.

Erst für $c < -\bar{x}c^*$ existiert auch für ein ungeordnetes Volumen ($t > 0$) eine geordnete Oberfläche. In diesem Fall lautet die Lösung der Differentialgleichung (4.9)

$$m(z) = \frac{2\tau}{\frac{2}{3}b + \sqrt{R} \operatorname{sh} \frac{z+z_0}{\xi}} \quad (4.15a)$$

mit

$$R = 2gt \quad (4.15b)$$

$$\xi = t^{-1/2} \quad (4.15c)$$

$$z_0 = \xi \operatorname{Arsh}\{(2\tau/m_1 - 2b/3)/R^{1/2}\} \quad (4.15d)$$

im Fall (3,4)

und ganz ähnlich

$$m(z) = \left\{ \frac{2\tau}{b/2 + \sqrt{R} \operatorname{sh}((z+z_0)/\xi)} \right\}^{1/2} \quad (4.16a)$$

mit

$$R = 4gt/3 \quad (4.16b)$$

$$\xi = \frac{1}{2} t^{-1/2} \quad (4.16c)$$

$$z_0 = \xi \operatorname{Arsh}\{(2\tau/m_1 - b/2)/R^{1/2}\} \quad (4.16d)$$

im Fall (4,6).

Den Verlauf dieser Profile zeigt Fig.14b.

An der Phasengrenzlinie S springt dieses Profil abrupt auf 0, so daß auch dieser Phasenübergang von 1. Ordnung ist. Der genaue Verlauf von S ($=c_s(t)$) kann nur numerisch aus der Bedingung $f_s\{m\}=0$ bestimmt werden, indem die Profile $m(z)$ in (4.12) eingesetzt werden. Aus der asymptotischen Form der Freien Energie (vgl.4.27) für $t \rightarrow 0^+$ erhält man allerdings den Anfang dieser Linie :

$$c_s(t) = -\bar{x} c^* + \frac{\bar{y}}{c^*} t \ln t, \quad t \rightarrow 0^+ \quad (4.17)$$

mit $\bar{y}=(1+\bar{x})^{-2}$ (3,4) bzw. $\bar{y}=2^{-1}(1+\bar{x})^{-1}$ (4,6). Das Profil hat wieder einen Wendepunkt z , dessen Abstand zur Oberfläche am Volumenphasenübergang $t=0^+$ divergiert (Phasenübergang E^+) und der die Ausdehnung der geordneten Oberflächenschicht angibt. Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das Phasendiagramm für halbunendliche Systeme mit einem diskontinuierlichen Phasenübergang im Volumen zwar ähnlich zu denjenigen mit einem kontinuierlichen Phasenübergang ist, jedoch zusätzlich einige Bereicherungen erfährt. So treten neben den erwarteten diskontinuierlichen Phasengrenzlinien O_1 und S auch Oberflächenphasenübergänge 2.Ordnung (O_2 , $\overline{sp}$, E^+) auf, an denen sich im Gegensatz zum Volumen kritische Exponenten definieren lassen.

Der Exponent β_1 , der das Verschwinden des Ordnungsparameters in der Oberfläche charakterisiert, folgt aus der Kenntnis der Profile. Am konti-

nuierlichen Obergang O_2 findet man mit (4.13) und (4.14) im Limes $t \rightarrow 0$ -

$$m_1 = m_b^* (c^2 - \tau^*)^{-1/2} |t|^{1/2} \quad (4.18)$$

Unabhängig vom Modell gilt somit $\beta_1 = 1/2$ am Obergang O_2 . Am multikritischen Punkt $\bar{s}p$ dagegen ist β_1 für die beiden betrachteten Modelle verschieden. Im Falle (3,4) findet man

$$m_1 = (m_b^*/g)^{1/3} |t|^{1/3} \quad (4.19a)$$

und damit $\beta_1 = 1/3$, während die Hamiltonfunktion (4,6) den Exponenten $\beta_1 = 1/4$ liefert :

$$m_1 = (3/2g)^{1/4} |t|^{1/4} . \quad (4.19b)$$

Am außergewöhnlichen Obergang E^+ schließlich zeigt m_1 kein singuläres Verhalten. Obwohl der Ordnungsparameter im Volumen springt, ist er an der Oberfläche stetig mit dem Wert

$$m_1(t=0) = (x/g)^{1/2} (\sqrt{\tau^*} - c)^{1/2} . \quad (4.20)$$

Das Hineinwachsen der (un-)geordneten Schicht läßt sich quantifizieren mit Hilfe des Wendepunktes λ der Profile (4.13) und (4.14) für die Übergänge O_2 und $\bar{s}p$ bzw (4.15) und (4.16) für E^+ . Man erhält aus ihnen

$$\lambda = -(\tau^*)^{-1/2} \beta_1 \ln|t| \quad (4.21a)$$

an den Übergängen 0_2 und $\overline{sp}$ und an E^+

$$\ell = -(\tau^*)^{-1/2} (y-x)^{-1} \ln t \quad . \quad (4.21b)$$

An allen kontinuierlichen Übergängen divergiert die Ausdehnung der Oberflächenschicht mit dem gleichen Exponenten

$$\beta_s = 0 \text{ (log)} \quad . \quad (4.22)$$

Die Notation β_s für diesen Exponenten wird durch die asymptotische Gleichung für die Exzessgröße

$$m_s = m_b^* \ell \quad (4.23)$$

gerechtfertigt, die an allen drei Übergängen $0_2, \overline{sp}$ und E^+ im Limes $t \rightarrow 0$ exakt gültig ist und auch anschaulich sofort einleuchtet.

Auch die Oberflächen-Freie-Energie selbst ist durch die Kenntnis des Ordnungsparameters $m(z)$ bereits vollständig bestimmt. Durch Einsetzen der Profile in (4.12) erhält man

$$f_s = c/2 m_1^2 + I + J \quad . \quad (4.24a)$$

Dabei ist an den Übergängen 0_2 und $\overline{sp}$ für die Hamiltonian (3,4)

$$I = Q/2g^2 (g - Q/(m_b - m_1)) cm_1 + 2c^3/3g (m_1/m_b - m_1)^3 + Q^2/2\xi g^2 - 2/3g\xi^3, \quad (4.24b)$$

$$J = 2^{-3/2} g^{-5/2} QR \ln \frac{A + \sqrt{A^2 + R}}{\sqrt{Q^2 + R} - Q}, \quad (4.24c)$$

$$A = 2b/3 - g(m_1 + m_b) \quad (4.24d)$$

und für das Modell (4,6)

$$I = -\frac{1}{2}(m_b^2 + R/2) \frac{cm_1^2}{m_b^2 - m_1^2} m_b \sqrt{2gQ/3} + \frac{3}{4g} \left\{ m_1 \left(\frac{cm_1}{m_b^2 - m_1^2} \right)^3 - m_b (2gQ/3)^{3/2} \right\}, \quad (4.24e)$$

$$J = -\sqrt{g/3} R(m_b^2 + R/2) \ln \frac{m_1 + \sqrt{m_1^2 + 2R}}{m_b + \sqrt{m_b^2 + 2R}}. \quad (4.24f)$$

Im Limes $t \rightarrow 0$ reduzieren sich diese komplizierten Ausdrücke auf die asymptotische Form

$$f_s^* = \sigma^* - a_1 \sigma^* \frac{|t|}{\tau^*} \beta_1 \ln |t| \quad (4.25a)$$

mit der Oberflächenspannung

$$\sigma^* = \begin{cases} (\tau^*)^{3/2}/3g & (3,4) \\ 1/4 \sqrt{3g} \tau^* & (4,6) \end{cases} \quad (4.25b)$$

und der Konstanten $a_1 = 3$ bzw. $a_1 = 2$.

Am Phasenübergang E^+ hat die Freie Energie ebenfalls die Form (4.24a) mit

$$I = \frac{b|c|}{3} (m_1 - m_b^*) + \frac{2}{3g} |c|^3 + \frac{1}{g} \tau^* \sqrt{t} - \frac{2}{3} (\tau^*)^{3/2} \quad (4.26a)$$

in Fall (3,4) bzw.

$$I = \frac{|c|}{4} (m_1^2 - m_b^2) + \frac{1}{4} \sqrt{\tau} m_b^{*2} \quad (4.26b)$$

im Falle (4,6). J ist beide Male gegeben durch

$$J = a_2 \sigma^* / \tau^* \ln \frac{\sqrt{2g/x}(m_1 - m_b^*) + |c|}{\sqrt{\tau} - \sqrt{\tau^*}} \quad (4.26c)$$

mit der Konstanten $a_2 = 3$ bzw. $a_2 = 1$.

Das asymptotische Verhalten für $t \rightarrow 0^+$ lautet

$$f_s = \sigma^* + f_s^* - a_2 \sigma^* t / \tau^* \ln t \quad (4.27a)$$

wobei

$$f_s^* = \sigma^* (1 - (1 + |c|/\sqrt{\tau^*})^{a_1}) \quad (4.27b)$$

Alle drei kontinuierlichen Phasenübergänge in der Oberfläche sind daher gekennzeichnet durch den gleichen singulären Anteil $t \ln|t|$ der Oberflächen-Freien-Energie f_s ! Dieser Term bewirkt im oberflächenproportionalen Anteil der spezifischen Wärme

$$c_s \sim - \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \sim |t|^{-\alpha_s} \quad (4.28)$$

eine durch den Exponenten $\alpha_s = 1$ beschriebene Divergenz.

Um die Beschreibung der Benetzungsübergänge im Rahmen der Molekularfeldtheorie zu vervollständigen, seien jetzt noch die schon in Kapitel 2 definierten Oberflächensuseptibilitäten bestimmt. Die Schicht- Schicht-suseptibilität $\chi(z, z')$, die der Gleichung

$$\left\{ - \frac{d^2}{dz^2} + f(m(z)) \right\} \chi(z, z') = \delta(z, z') \quad (4.29a)$$

$$\frac{d}{dz} \chi(z, z') \big|_{z'=0} = c \chi(z, z') \quad (4.29b)$$

genügt, schreibt sich mit Hilfe der beiden Fundamentallösungen zu (4.29a)

$$u_1(z) = m'(z) \quad (4.30a)$$

$$u_2(z) = u_1(z) \int_0^z dx \, m'(x)^{-2} \quad (4.30b)$$

für $z \geq z'$ in der Form

$$\chi(z, z') = u_1(z) (B u_1(z') + u_2(z')) \quad (4.31)$$

($z \leftrightarrow z'$ für $z < z'$) mit $B^{-1} = c^2 m_1^2 - c m_1 \cdot \partial f / \partial m \big|_{m_1}$.

Daraus erhält man die schon in Kap.2 definierten Suszeptibilitäten

$$x_1 = \frac{m_b - m_1}{(c^2 - \tau)m_1 + bm_1^{x-1} - gm_1^{y-1}} \quad (4.32a)$$

$$x_{11} = c m_1 / (m_b - m_1) \cdot x_1 \quad (4.32b)$$

und

$$x_s = -B(m_b - m_1)^2 + \int_0^\infty dz \left\{ x_b - \left(\frac{m_b - m(z)}{m'(z)} \right)^2 \right\} \\ - \lim_{L \rightarrow \infty} \left\{ m(L) - m_b \right\} \int_0^L dz (m_b - m(z)) m'^{-2}(z) \quad (4.32c)$$

Das erste Integral im Ausdruck für x_s divergiert an den drei Übergängen 0_2 , $\overline{sp}$ und E^+ proportional zu t^{-1} , so daß

$$\gamma_s = 1 \quad (4.33)$$

in allen Fällen. Aus (4.32a und b) folgen mit Hilfe des schon bekannten kritischen Verhaltens von m_1 die Exponenten

$$\gamma_1 = \begin{cases} 1/2 & , \quad 0_2 \\ (x-1)/x & , \quad \overline{sp} \end{cases} \quad (4.34)$$

und

$$\gamma_{11} = \begin{cases} 0 & , \quad 0_2 \\ (x-2)/x & , \quad \overline{sp} \end{cases} \quad (4.35)$$

4.3 Skalenform der Freien Energie und kritische Benetzung

Obwohl sich das vorhergehende Kapitel auf verschwindende äußere Felder h und h_1 beschränkte, läßt sich unter Annahme einer Skalenform für die Freie Energie f_s doch ein vollständiges Bild gewinnen. Alle abgeleiteten Exponenten sind nämlich konsistent mit der an einem kritischen Punkt zu erwartenden Form

$$f_s(t, h, h_1) = t^{2-\alpha_s} \equiv (h/t^\Delta, h_1/t^{\Delta_1}) \quad (4.36)$$

mit den drei Exponenten $\alpha_s = 1$, $\Delta = 1$ (an O_2 , $\overline{sp}$, E^+) und $\Delta_1 = 1/2$ (an O_2) bzw. $\Delta_1 = 2/3$ und $3/4$ (an $\overline{sp}$). Dies erlaubt die Berechnung des kritischen Verhaltens für den noch ausstehenden Fall, daß sich das System auf der Koexistenzlinie $t=0$ befindet und die Phasengrenzfläche durch ein endliches Feld $h_1 > 0$ an der Oberfläche festgehalten wird. An den Phasenübergängen O_2 und $\overline{sp}$ muß dann im Limes $h_1 \rightarrow 0+$ der Grenzflächenabstand wieder divergieren. Mit Hilfe von (4.36) findet man für diesen Fall leicht die folgenden kritischen Exponenten :

$$\beta_s = 0 \text{ (log) , } O_2 \text{ und } \overline{sp} \quad (4.37a)$$

$$\beta_1 = \begin{cases} 1 & , \quad O_2 \\ 1/2 & , \quad 1/3 \quad , \quad \overline{sp} \end{cases} \quad (4.37b)$$

$$\gamma_s = \begin{cases} 2 & , \quad O_2 \\ 3/2 & , \quad 4/3 \quad , \quad \overline{sp} \end{cases} \quad (4.37c)$$

$$\gamma_{11} = \begin{cases} 0 \text{ (disk.)} & , \quad O_2 \\ 1/2 & , \quad 2/3 \quad , \quad \overline{sp} \end{cases} \quad (4.37d)$$

$$\gamma_1 = 1, 0_2 \text{ und } \overline{sp} \quad (4.37e)$$

(streng genommen müßten für diese Exponenten andere Bezeichnungen eingeführt werden; dies unterbleibt wegen der besseren Übersichtlichkeit). Die beiden Fälle $h_1 = 0, t \rightarrow 0$ und $t = 0, h_1 \rightarrow 0$ entsprechen offenbar gerade der von Cahn getroffenen Unterscheidung zwischen vollständiger und kritischer Benetzung (s.Kap.4.1): im ersten Fall nähert man sich aus dem Einphasengebiet der Koexistenzlinie, während der Weg im zweiten Fall entlang der Koexistenzlinie führt. Somit besteht eine vollständige Korrespondenz zwischen der oberflächeninduzierten Unordnung und der Benetzung. Dieser Zusammenhang wurde von Kroll und Lipowsky⁷⁷ explizit durch die Abbildung der jeweiligen Hamiltonfunktionen aufeinander gefunden. Es zeigte sich dabei, daß die SID-Übergänge in t -Richtung der vollständigen Benetzung bei $T=T_w$ entsprechen (vgl. Fig.12).

In der kurzen Zeit seit der Veröffentlichung dieser Molekularfeldtheorie sind eine Fülle von Arbeiten erschienen, die sich mit dem Einfluß von Fluktuationen auf die Benetzungsübergänge befassen¹¹¹⁻¹¹⁴. Während in der Molekularfeldtheorie die Grenzfläche als flach angenommen wird (beschrieben durch die einzige Koordinate l), betrachten diese erweiterten Theorien eine fluktuierende Fläche, deren Abstand zur Oberfläche $l(\underline{r})$ ortsabhängig ist. Für $l(\underline{r})$ lassen sich dann effektive Modelle ableiten, die mit Renormierungsmethoden untersucht werden. Es stellt sich heraus, daß die Molekularfeldtheorie oberhalb von drei Dimensionen für die vollständige Benetzung die richtigen Resultate liefert¹¹⁴.

Im Falle der kritischen Benetzung weichen in drei Dimensionen jedoch die Exponenten drastisch von ihren klassischen Werten ab. Für große Oberflächenspannung σ gibt es zwei Bereiche mit nichtuniversellen, σ -ab-

hängigen Exponenten, während für kleinere Oberflächenspannungen gar eine wesentliche Singularität vorliegt. Auch in zwei Dimensionen, in denen die Grenzfläche eindimensional ist und die effektiven Modelle sich mit Transfermatrixmethoden exakt lösen lassen¹⁰⁴⁻¹⁰⁸, sind die Exponenten andere als die klassischen.

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß die oben vorgestellten Modelle nur für kurzreichweitige Wechselwirkungen Gültigkeit haben. Im Falle von langreichweitigen Wechselwirkungen (z.B. von-der-Waals- WW) bleiben die qualitativen Aspekte der Theorie erhalten, jedoch ändern sich die Werte der Exponenten^{81,91-94,103}. Fluktuationen spielen hier keine Rolle. Die Forschung konzentriert sich deshalb auf die Frage, unter welchen Bedingungen realistische Systeme kritische Benetzung bzw. Benetzung 1. Ordnung aufweisen⁹¹⁻⁹⁴.

4.4 Grenzflächendelokalisierung bei Supraleitern.

Die weite Verbreitung von Benetzungsübergängen in der Natur wird durch das Beispiel der Supraleitung um einen weiteren, interessanten Fall bereichert. Erstaunlicherweise ist dieses Phänomen trotz der umfangreichen Arbeiten auf dem Gebiet der Supraleitung bisher nicht entdeckt worden.

In der Ginzburg-Landau-Theorie des Supraleiters schreibt sich die Freie Energie in Abhängigkeit vom komplexen Ordnungsparameter ψ ("Wellenfunktion der Cooper-Paare") und dem magnetischen Vektorpotential $\underline{A}$ in der Form

$$F(\psi, \underline{A}) = \int d^d x \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \underline{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{t}{2} |\psi|^2 + \frac{g}{4!} |\psi|^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{8} \frac{1}{\pi} (\text{rot } \underline{A})^2 \right\} \quad (4.38)$$

$t \sim T - T_c$ mißt den Abstand zur BCS-Temperatur T_c und läßt sich ebenso wie g durch mikroskopische Parameter ausdrücken^{87,88}. Wenn alle Längen in Einheiten der Kohärenzlänge $\xi = \hbar/\sqrt{m t}$ gemessen werden und ψ und $\underline{A}$ durch die dimensionslosen Größen $f = \psi/\sqrt{-6t/g\kappa}$ und $\underline{a} = \underline{A}/(2e\xi/c t)$ ersetzt werden, lautet (4.38)

$$F(f, \underline{a}) = \frac{6t^2 \xi^d \kappa^2}{g} \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} |(i \Delta + \underline{a}) f|^2 - \frac{1}{2} |f|^2 + \frac{\kappa^2}{4} |f|^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (\text{rot } \underline{a})^2 \right\} \quad (4.39)$$

Man erkennt, daß ein Supraleiter (zumindest im Rahmen dieser Theorie) durch einen einzigen, dimensionslosen Parameter $\kappa = \lambda/\xi := mc\sqrt{g}/\sqrt{96\pi e^2 \hbar^2}$ charakterisiert ist, der das Verhältnis von magnetischer Eindringtiefe λ zur Kohärenzlänge angibt. Das Phasendiagramm zur Freien Energie (4.39) unterhalb der BCS-Temperatur ($t < 0$) in Abhängigkeit von κ und einem äußeren Magnetfeld $\underline{b} = \text{rot } \underline{a}$ ist seit langem bekannt (vgl. Fig. 15). Für $\kappa \leq \kappa_c = 1/\sqrt{2}$ hat man einen Typ-I-Supraleiter, der bei Erhöhung des Magnetfeldes über den kritischen Wert $b_c = 1/\sqrt{2}\kappa$ durch einen Phasenübergang 1. Ordnung vom supraleitenden in den normalleitenden Zustand übergeht. In Typ-II-Supraleitern, die für $\kappa > \kappa_c$ vorliegen, geschieht dieser Übergang allmählich, indem sich zwischen normalleitenden und supraleitenden Zustand für $b_{c1} < b < b_{c2} = 1$ eine Vortexphase einschleibt. In dieser Phase kann das

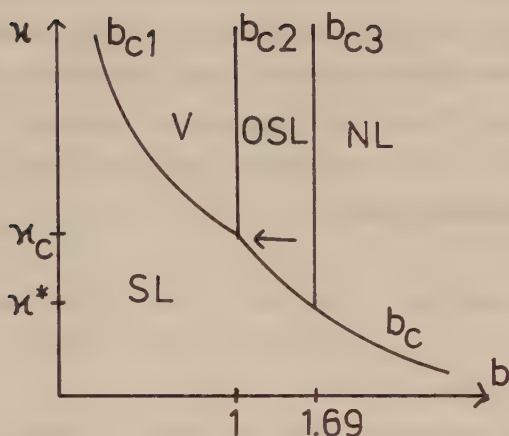


Fig. 15: Phasendiagramm für Supraleitung in Abhängigkeit vom Ginzburg-Landau-Parameter κ und dem parallelen Magnetfeld b . NL und SL bedeuten normal- bzw. supraleitend, V kennzeichnet die Vortexphase und OSL den Bereich der Oberflächensupraleitung.

äußere Feld in Wirbeln in den Supraleiter eindringen. Anfang der 60-er Jahre fand man heraus⁸⁸, daß für $\kappa > \kappa^* = 0.42$ bei Anlegen eines Magnetfeldes parallel zur Oberfläche diese für $b_{c3} < 1.69$ supraleitend bleibt, obwohl das Material im Volumen normalleitend ist. Bei b_{c3} geht der Ordnungsparameter in völliger Analogie zum Oberflächenphasenübergang S in halbusendlichen Systemen (Kap.2) mit einem Exponenten $\beta_1 = 1/2$ nach null. Fink und Kessinger⁸⁹ lösten numerisch die Gleichungen für Ordnungsparameter und Magnetfeld, übersahen jedoch den für $\kappa = \kappa_c$ möglichen Benetzungsübergang.

Betrachten wir ein Magnetfeld parallel zur Oberfläche in x-Richtung $\underline{b}(z) = b(z) \underline{e}_x$ mit der Randbedingung $b(0) = b_0 < b_{c3}$. Aus dem Verschwinden des Suprastroms durch die Oberfläche folgt die weitere Randbedingung $f'(0) = 0$. Wenn für das Vektorpotential die Eichung $\underline{a}(z) = a(z) \underline{e}_y$ gewählt wird, gilt $b(z) = a'(z)$ und man erhält durch Minimierung von (4.39) die Ginzburg-Landau-Gleichungen

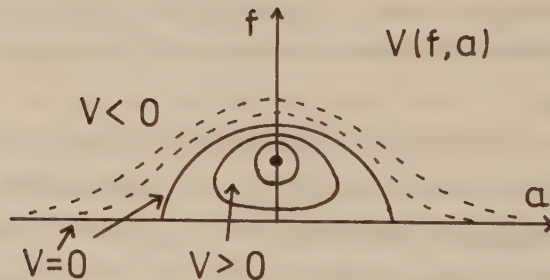
$$f''(z) = - \partial V / \partial f \quad (4.40)$$

$$a''(z) = - \partial V / \partial a$$

mit

$$V(f, a) = \frac{1}{2} (1 - a^2)^2 g^2 - \frac{\kappa^2}{4} g^4 \quad (4.41)$$

Fig.16



(4.40) ist äquivalent zur Bewegung eines Teilchens im zweidimensionalen Potential V mit z als "Zeit". Das Potential ist in Fig.16 skizziert. Bei $a = 0$ und $f = \kappa^{-1}$ hat es ein Maximum der Höhe $V_{\max} = b_c^2/2$. Auf der a -Achse und einer halbkreisförmigen Linie, die das Maximum einschließen, ist das

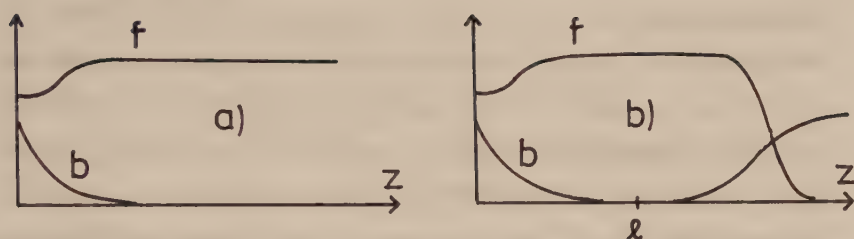


Fig.17: Profil der supraleitenden Dichte und des Magnetfeldes

a) im Bereich SL b) im Bereich OSL

Potential null, während es weiter außen steil ins Negative abfällt. Die möglichen Zustände des Supraleiters lassen sich an Hand der möglichen Bewegungen des Teilchens in diesem Potential verstehen. Die Randbedingungen für f und b bedeuten, daß das Teilchen zur Zeit $z=0$ mit der Geschwindigkeit $a'(0) = b_0$ losgeschossen wird. Für $b_0 < b_{c3}$ startet das Teilchen links von der f -Achse und nähert sich asymptotisch dem Maximum des Potentials. Die resultierenden Profile für f und b zeigt Fig.17a). Für $b_0 > b_{c3}$ dagegen ist die einzig mögliche Lösung eine Bewegung mit konstanter Geschwindigkeit b entlang der a -Achse, d.h. das System ist normalleitend und das Feld vollständig eingedrungen. Für dazwischenliegende Werte von b_0 startet das Teilchen auf der halbkreisförmigen Linie $V=0$. Es bewegt sich zunächst auf das Maximum zu, wird jedoch am Berg reflektiert und nähert sich asymptotisch der a -Achse, an der es entlangläuft. Die Profile haben in diesem Fall die in Fig.17b gezeigte Form : an der Oberfläche bildet sich eine supraleitende Schicht aus, in der das Magnetfeld nahezu auf 0 absinkt. Die Ausdehnung dieser Schicht läßt sich am bequemsten durch die

Lage λ des Maximums von f (dies ist gleichzeitig das Minimum von b) charakterisieren. Für $b \rightarrow b_c^+$ kann λ divergieren, denn die kinetische Anfangsenergie $b_0^2/2 \rightarrow b_c^2/2$ reicht geradeaus, um asymptotisch das Maximum zu erreichen (die potentielle Anfangsenergie V ist null). Die numerische Lösung zeigt jedoch, daß dies nur für $\kappa = \kappa_c$ der Fall ist. Für $\kappa < \kappa_c$ ist der Phasenübergang auch in der Oberfläche diskontinuierlich. Die Größe der Diskontinuität, die sich durch den Sprung des Oberflächenordnungsparameters charakterisieren läßt, geht nach 0 für $\kappa \rightarrow \kappa_c$. Fig.18 zeigt einen einfach-logarithmischen Plot des halben Grenzflächenabstandes λ als Funktion von $b_0 - b_c$, der aus einer numerischen Integration der Bewegungsgleichungen mit $\kappa = \kappa_c$ gewonnen wurde. Man erkennt, daß die Divergenz wieder einem logarithmischen Gesetz gehorcht. Der Phasenübergang entspricht damit der im vorigen Kapitel vorgestellten oberflächeninduzierten Ordnung E^+ .

Dem Experiment steht damit ein weiteres, interessantes System zur Messung von Benetzungsübergängen zur Verfügung. Eine Möglichkeit bestände im Ausnutzen des Skin-Effektes, der einen von der Ausdehnung der supra-leitenden Schicht abhängigen Widerstand erwarten läßt. Einen anderen Weg würde die Totalreflexion von polarisierten Neutronen eröffnen. Die Reflektivität der Neutronen hängt nämlich von ihrer Polarisierung relativ zum Magnetfeld und dessen Verlauf als Funktion des Abstandes zur Oberfläche ab. Felcher et al.⁹⁰ haben dies mit Erfolg ausgenutzt, um die Eindringtiefe des Magnetfeldes in Niob unterhalb des kritischen Feldes h_{c1} zu messen.

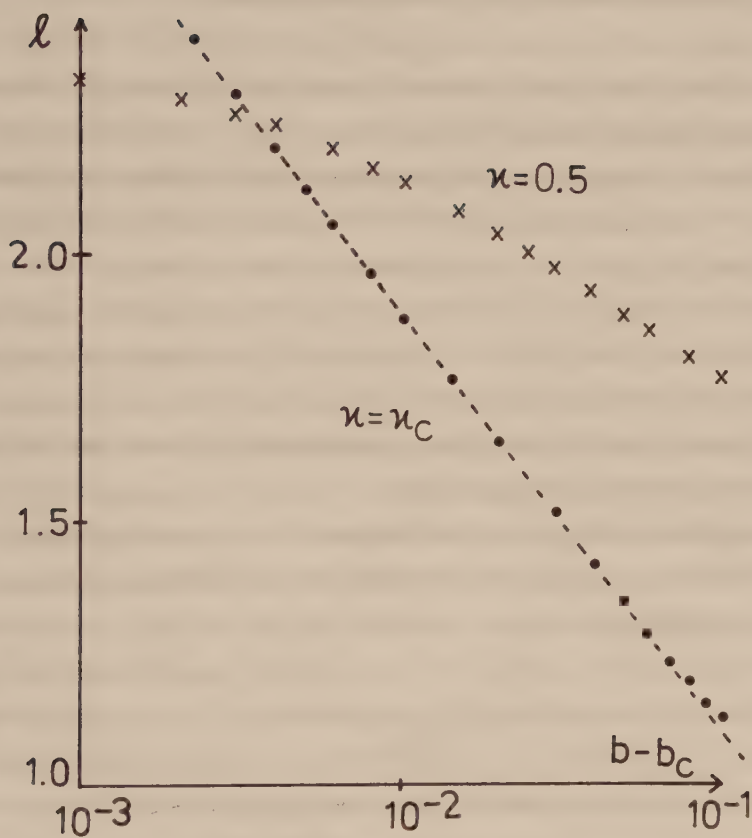


Fig.18: Halbe Ausdehnung der supraleitenden Oberflächenschicht. Bei Annäherung an das kritische Feld b_c divergiert sie logarithmisch für $\kappa = \kappa_c$. Sie bleibt endlich für $\kappa < \kappa_c$.

4.5 Monte-Carlo-Simulation von Benetzungsübergängen

Um die in Kap.4.2 geschilderten Eigenschaften experimentell zu testen, bietet sich neben den physikalisch oft recht komplizierten Versuchsaufbauten realer Systeme auch ein Computerexperiment an. Monte-Carlo-Simulationen für halbbunendliche Systeme^{57,58,66,67} wurden schon mit Erfolg durchgeführt (vgl.Kap.3). Für Benetzungsübergänge dagegen liegt erst eine Arbeit von Binder et al.^{109,110} vor. Die von mir durchgeführte Simulation geht darüber hinaus, indem sie erstmals die für die Charakterisierung der Phasengrenzfläche wichtigen Größen Rauigkeit und Positionsschwankungen (χ_s) mißt. Vor allem aber wird auch der Einfluß eines zufälligen Oberflächenefeldes auf die Benetzung betrachtet.

Das simulierte System ist ein Ising-Modell in einem äußeren Oberflächenfeld h_1 auf einem $30 \times 30 \times 20$ -Gitter mit Spin-Variablen $s_i = \pm 1$ und Hamiltonfunktion

$$\beta \mathcal{H} = K \left(\sum_{\langle i,j \rangle} J_s(i,j) s_i s_j + h_1 \sum_{i \in 1} s_i \right) \quad (4.42)$$

Die erste Summe läuft über alle Paare von nächsten Nachbarn, wobei

$$J_s(i,j) = \begin{cases} J_s & , \text{ i und j in der 1. oder 20. Schicht} \\ 1 & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (4.43)$$

das Verhältnis von Oberflächen- zu Volumenkopplungen bezeichnet. Senkrecht zu den beiden freien Oberflächen in der 1. und 20. Schicht wurden periodische Randbedingungen auferlegt. Alle Simulationen wurden bei der konstanten Volumenkopplung $K = 0.3$ durchgeführt, was einer Temperatur von etwa

$2/3 T_C$ entspricht ($K_C = 0.22$). Die Kontinuumsversion von (4.42) ist gerade die in Kapitel 2 vorgestellte ϕ^4 -Theorie des halbinendlichen Systems in einem äußeren Oberflächenfeld h_1 . Diese läßt sich mit einer einfachen Transformation⁷⁷ auf die in 4.2 betrachtete ϕ^3 -Theorie abbilden. Alles dort Gesagte gilt unverändert, wenn man m_1 durch m_1+m_b ersetzt und beachtet, daß die kritische Benetzung hier für

$$h_1 \rightarrow h_1^* = -c m_b \quad (4.44)$$

stattfindet. Die vollständige Benetzung, die die Variation eines Volumenfeldes verlangt, wird hier nicht betrachtet, da dafür die Molekularfeldnäherung ausreichend sein sollte. Stattdessen möchte ich den Einfluß von imperfekten Oberflächen auf die kritische Benetzung untersuchen. Da Oberflächen in der Realität nie vollkommen, sondern uneben und mit adsorbierten Verunreinigungen behaftet sind, ist dies eine wichtige Frage bzgl. der Beobachtung von Benetzungsübergängen. Die Unvollkommenheiten wurden simuliert durch ein zufälliges Oberflächenfeld h_1 , welches durch seine Verteilung $W(h_1)$ charakterisiert ist. Für W wurden zwei extreme Fälle unterschieden :

1. eine Gaußverteilung W_1 mit Mittelwert h_{1m} und Varianz σ ;
2. eine diskrete, zweigipflige Verteilung mit $W_2(h_1=-2) = p$ und $W_2(h_1=0) = 1-p$, die auf dem Bild zufällig verteilter Verunreinigungsatome auf der Oberfläche beruht. In diesem Fall ist der Mittelwert des Feldes $h_{1m}=-2p$ durch deren Konzentration p bestimmt.

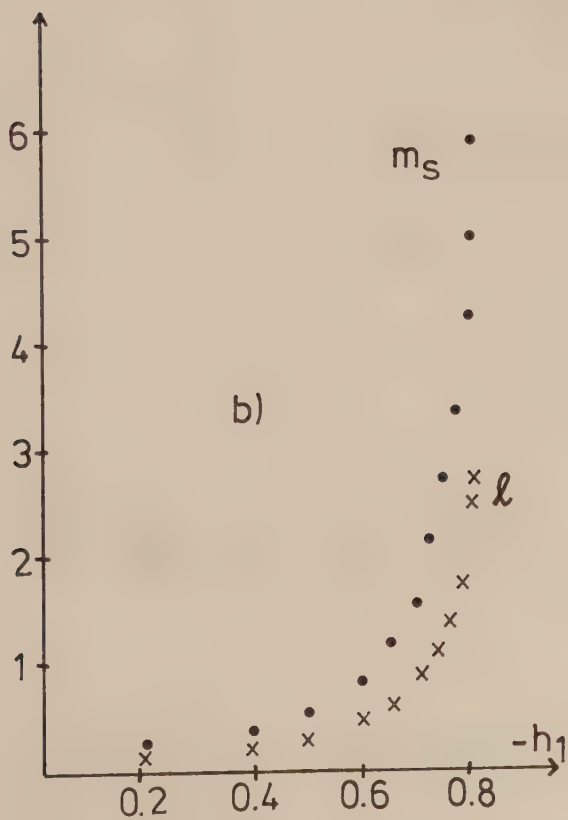
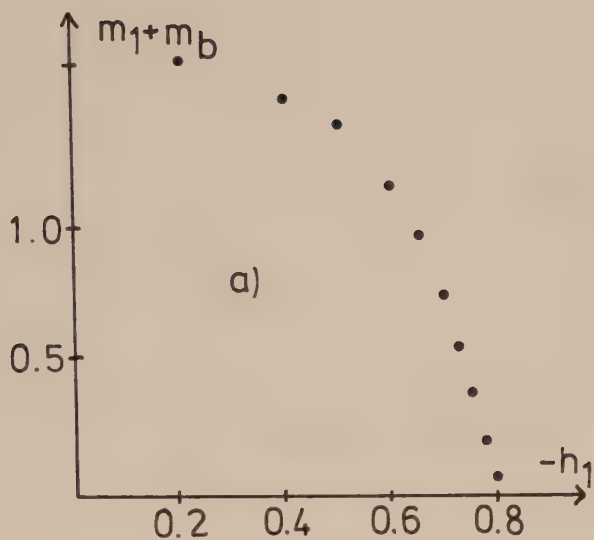
Man beachte, daß h_1 für die Benetzungsübergänge die Rolle eines nicht-

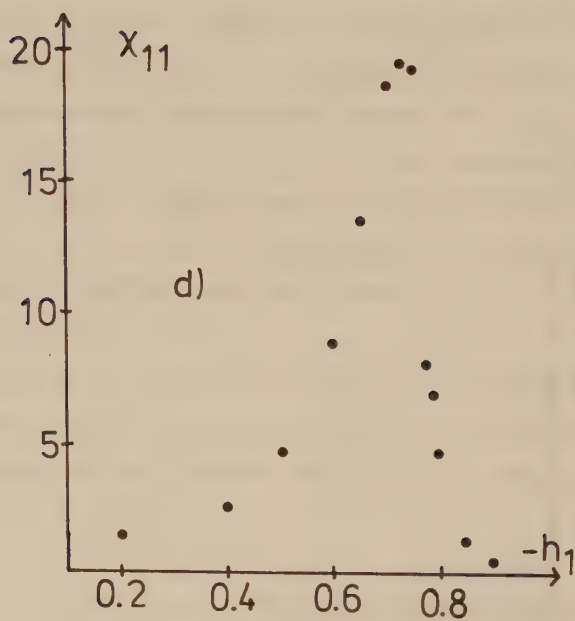
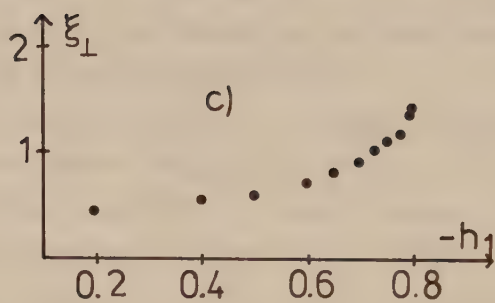
ordnenden Feldes spielt. Das Oberflächenfeld bildet nämlich zusammen mit der Temperatur in einer geeigneten Linearkombination ein Skalenfeld. Die Ergebnisse dieser Simulation sollten daher auch den Effekt zufälliger Kopplungen in der Oberfläche widergeben.

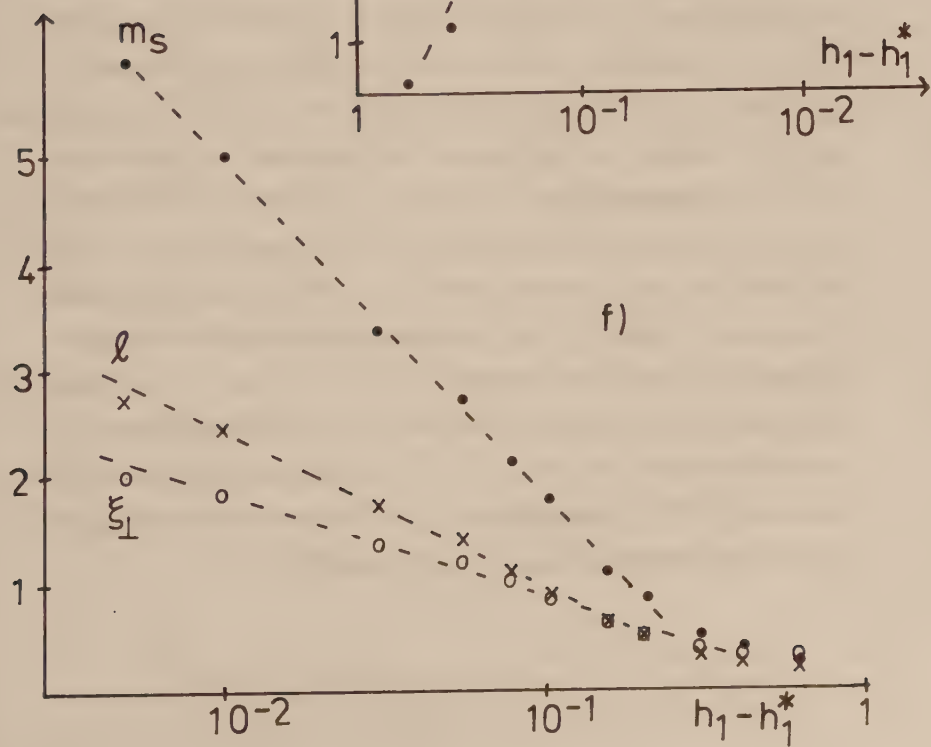
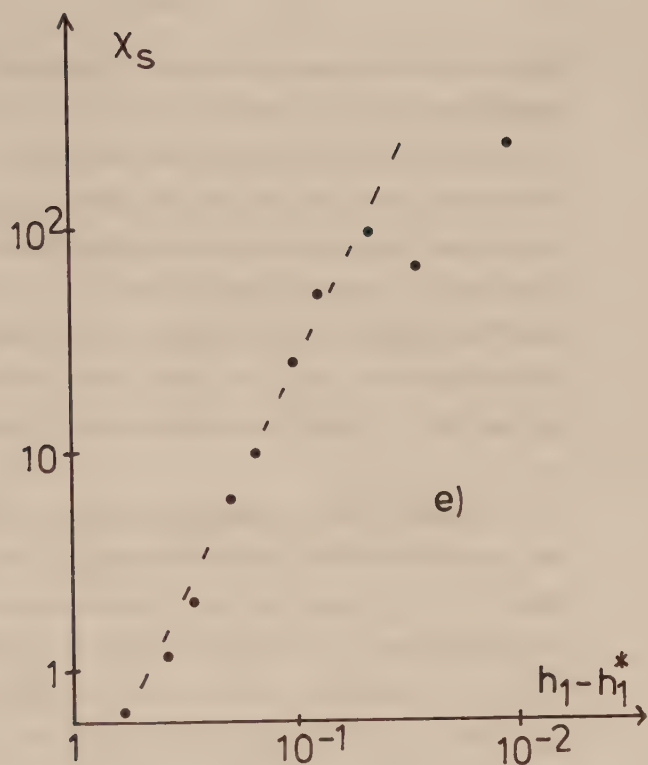
Bei den Läufen wurde je nach Nähe zum Phasenübergang 500-2000 Monte-Carlo-Schritte (MCS) gewartet, bis sich ein Gleichgewicht eingestellt hatte. Anschließend wurden dann für homogenes Feld und Verteilung W_2 7500 MCS gemittelt, für Verteilung W_1 4000 MCS. Zusätzlich wurde noch bei W_2 über 3 und bei W_1 über 1-3 Realisationen der Verteilung gemittelt. Wegen der großen Oberfläche ($A=900$) sind die Messungen nicht sehr empfindlich auf die Realisation. Meßgrößen waren neben dem Profil $m_i, i=1..20$, aus dem sich m_1 , m_s und die mittlere Grenzflächenposition $\bar{x}$ bestimmen lassen, die Oberflächensuszeptibilität $\chi_{11}=A\langle(m_1-\langle m_1 \rangle)^2\rangle$, die Größe $\chi_s=A\langle(\bar{x}-\langle \bar{x} \rangle)^2\rangle$, die die Schwankungen der Grenzfläche charakterisiert, sowie deren Rauigkeit $\xi_{\perp}^2=\langle[(\ell_i-\bar{x})^2]\rangle$. ℓ_i ist die aktuelle Grenzflächenposition an der Oberflächenkoordinate i und $\langle \dots \rangle$ bedeutet eine räumliche Mittelung der Oberfläche. Wenn man über Molekularfeldtheorie hinausgeht und gaußische Fluktuationen mitnimmt, divergiert die Rauigkeit mit einem logarithmischen Gesetz⁸¹: $\xi_{\perp}^2 \sim \ln(h_1-h_1^*)$.

Betrachten wir zunächst das homogene Oberflächenfeld. Die Ergebnisse der Simulation mit $J_s=1$ sind in den Fig.19a)-e) (linear) und Fig.19f) (log.) dargestellt. Das kritische Feld liegt bei $h_1^* = -0.805 \pm 0.005$.

Fig. 19 a)-f): Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das homogene Oberflächenfeld

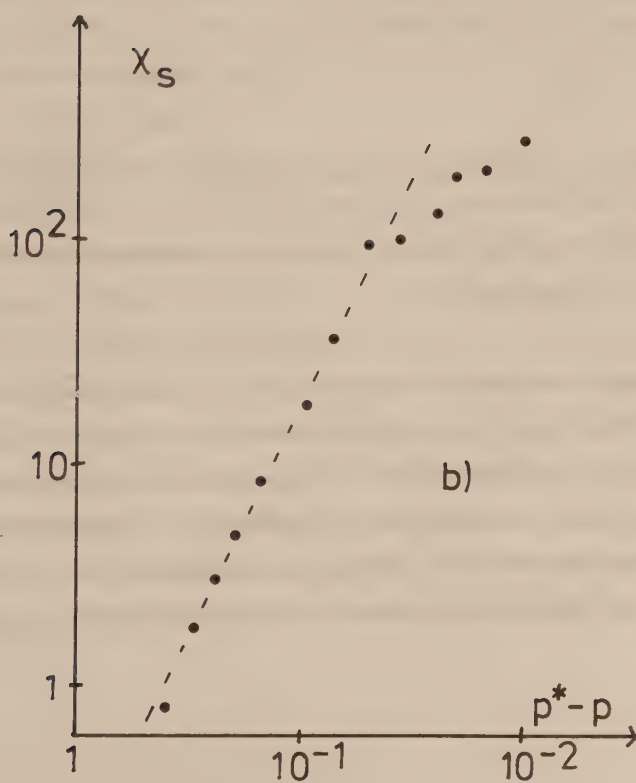
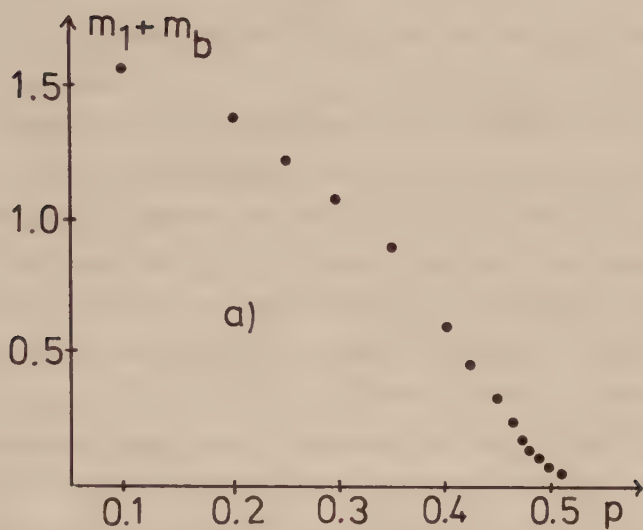






Die Molekularfeldergebnisse aus Kap.4.2 werden voll bestätigt : der Ordnungsparameter in der Oberfläche geht linear nach null und die Größen m_s , λ und ξ gehorchen einem logarithmischen Gesetz. Fluktuationen spielen also offenbar erst sehr nahe am kritischen Feld ($h_1 - h_1^* < 10^{-3}$) eine Rolle, so daß Abweichungen von der Molekularfeldtheorie experimentell wahrscheinlich schwer zu beobachten sind. Offenbar ist es so, daß sich die Phasengrenzfläche zunächst nur sehr langsam von der Oberfläche löst. Erst bei größeren Abständen von der Oberfläche setzen stärkere Fluktuationen ein und bewirken ein schnelleres Hineinlaufen mit nichtuniversellen Exponenten.

Die Suszeptibilität χ_{11} zeigt einen starken, nicht erwarteten Anstieg, der allerdings deutlich vor dem Phasenübergang in ein Maximum mündet. Danach fällt χ_{11} wieder steil ab, so daß sich kein Widerspruch zum Molekularfeldexponenten $\gamma_{11}=0$ ergibt. Lediglich die Schwankung der Interfaceposition χ_s wächst etwas stärker an als es der Molekularfeldexponent $\gamma_s=2$ erwarten läßt. Die in Fig.19e) eingezeichnete Gerade hat die Steigung 2.3. Allerdings weichen die Meßpunkte für diese Größe in einem Abstand $< 10^{-2}$ zum Phasenübergang von der Geraden ab. Möglicherweise muß für χ_s wesentlich länger gemittelt werden als für die anderen Größen. Es könnte aber auch sein, daß χ_s empfindlicher auf die endliche Größe des Systems reagiert. Der Exponent $\gamma_{||}$, der das Anwachsen der parallelen Korrelationslänge in der Oberfläche charakterisiert, hat den Wert 1 in Molekularfeldnäherung. Das bedeutet, daß man bei einer linearen Ausdehnung von 30 Gitterkonstanten etwa bei $h_1 - h_1^* = 10^{-2}$ Finite-Size-Effekte sehen sollte. Binder et al.^{109,110} finden eine mit $\gamma_{||}=1$ verträgliche Abhängigkeit der Position des Maximums von χ_{11} von der Systemgröße.



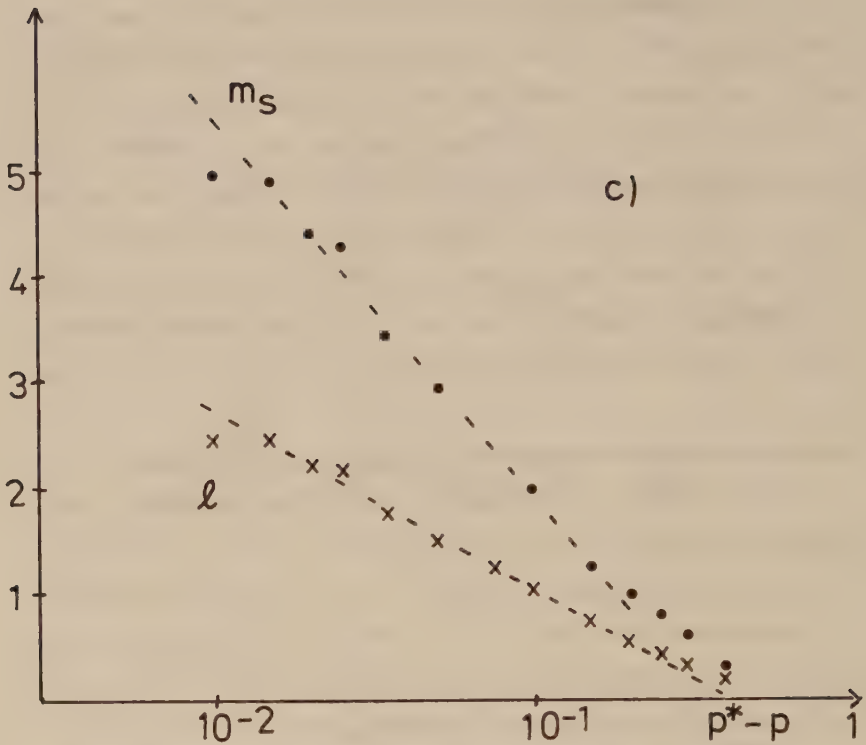


Fig.20 a)-c): Monte-Carlo-Simulation mit zufälligem Oberflächenfeld
(Verteilung W_2)

Das schnelle Anwachsen der parallelen Korrelationen einerseits und das langsame Hineinlaufen der Grenzfläche andererseits lassen es als zweifelhaft erscheinen, ob Monte-Carlo-Simulationen überhaupt in der Lage sind, die nichtuniversellen Exponenten zu beobachten. Der wahre kritische Bereich beginnt erst bei großen Abständen der Grenzfläche von der Oberfläche. Der hier erreichte maximale Abstand von $l \approx 3$ ist sicherlich noch zu klein.

Eher ist es erstaunlich, daß man in diesem Bereich überhaupt schon Potenzgesetze beobachtet.

Die Ergebnisse für die verunreinigte Oberfläche mit Verteilung W_2 zeigt Fig.20a)- c). Der Phasenübergang findet statt bei einer kritischen Konzentration $p^* = 0.5 \pm 0.005$. Dies bedeutet eine Verschiebung zu einem höheren kritischen Feld $h_{1m}^* = -1.0$. Gleichzeitig wird er "kontinuierlicher", wie man am flacheren Verlauf der Kurve $m_1 + m_b$ gegenüber demjenigen für das homogene Feld erkennt (Fig.20a). Das bedeutet, daß man sich weiter vom multikritischen Punkt $\bar{sp}$ entfernt, der kontinuierliche und diskontinuierliche Benetzung trennt. Dies ist allerdings auch der einzige Effekt der Zufälligkeit des Oberflächenfeldes, denn das kritische Verhalten aller Meßgrößen ist auch in diesem Fall durch die Molekularfeldexponenten beschrieben. Die bei χ_s eingezeichnete Gerade hat die Steigung 2.15, liegt also näher am Molekularfeldwert 2 als das Ergebnis der Simulation mit dem homogenen Oberflächenfeld.

Die Verschiebung weg vom Punkt $\bar{sp}$ legt die Frage nahe, ob der diskontinuierliche Phasenübergang O_1 durch die Zufälligkeit des Oberflächenfeldes zu einem kontinuierlichen Übergang werden kann. Um diese Frage zu beantworten, wurde die Oberflächenkopplung J_s auf 1.25 erhöht und mehrere Meßreihen mit der Verteilung W_1 und Varianzen $\sigma = 0, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.5$ und 2 durchgeführt. Fig.21 zeigt die Ergebnisse für den Oberflächenordnungsparameter. Im homogenen Fall ($\sigma = 0$) und für $\sigma = 0.1$ und 0.25 ist der Phasenübergang stark diskontinuierlich. Die diskontinuierliche Natur des Phasenübergangs zeigt sich auch in einer ausgeprägten Tendenz zur Domänenbildung : in vielen Läufen kam es vor, daß sich die beiden Oberflächen in verschiedenen Phasen befanden mit einer Phasengrenzfläche in der Mitte.

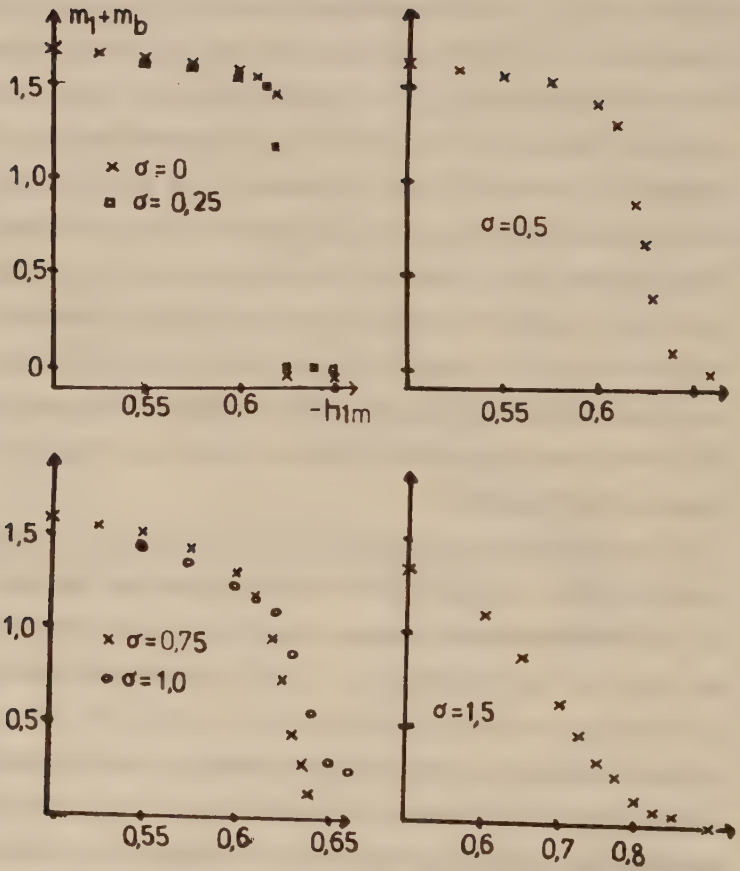


Fig.21: Monte-Carlo-Simulation mit Verteilung W_1 und Oberflächenkopplungen
 $J_s = 1.25$

Dies steht in starkem Gegensatz zu den kontinuierlichen Phasenübergängen, wo sich immer ein symmetrisches Profil ergab. Diese Hysterese macht die genaue Lokalisierung des Phasenübergangs schwierig.

$\sigma=0.5$ nimmt eine Sonderstellung ein. Die Fluktuationen sind hier so groß, daß die Natur des Phasenübergangs schwierig zu entscheiden ist. Die Meßwerte für x_{11} , x_s und ξ schwanken so stark, daß sich keine sinnvollen Informationen aus ihnen ziehen lassen. Das läßt vermuten, daß wir uns hier in der Nähe des trikritischen Punktes $\overline{sp}$ befinden. (m_1+m_b) zeigt für $\sigma=0.5$ eher eine Wurzelsingularität, wie es der Exponent $\beta_1=1/2$ an $\overline{sp}$ erwarten läßt.

Für die größeren Werte von σ ist der Phasenübergang auf jeden Fall kontinuierlich mit den normalen Molekularfeldexponenten. Es folgt wieder eine Verschiebung zu höheren Werten von $|h_{1m}|$. Fig.22 zeigt einen etwa quadratischen Anstieg des kritischen Feldes mit der Varianz σ . Dies ist in völliger Obereinstimmung mit einer Rechnung von Forgacs et al.¹¹⁵, die im Rahmen von Molekularfeldtheorie und der Annahme nicht gebrochener Replica-symmetrie im Limes $\sigma \rightarrow 0$ fanden, daß sich der Einfluß der Zufälligkeit lediglich in einer Renormierung der Oberflächenkopplung c ausdrückt :

$$c(\sigma) = c_0 + c_1 \sigma^2 + O(\sigma^4) \quad . \quad (4.45)$$

Mit (4.44) folgt dann der beobachtete quadratische Anstieg des kritischen Oberflächenfeldes.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß ich für die Verteilung W_1 und das homogene Feld die gleiche Simulation auch in zwei Dimensionen durchgeführt habe. Genau wie in drei Dimensionen bewirkt die Unordnung

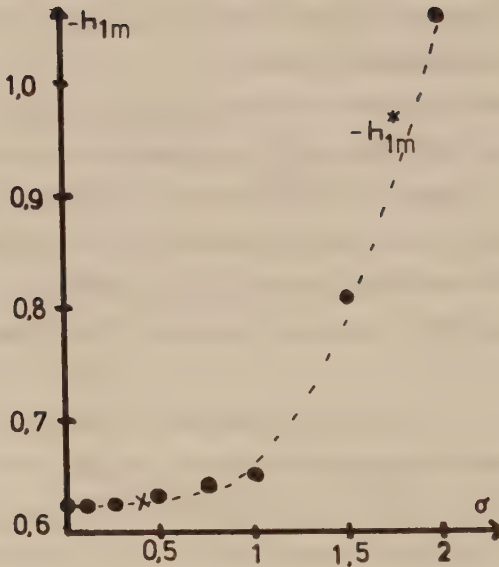


Fig.22: Phasendiagramm für zufälliges Oberflächenfeld. Unterhalb der Linie $h_{1m}(\sigma)$ ist die Grenzfläche an die Oberfläche gebunden.

eine Verschiebung des Phasenübergangs zu höheren Werten von $|h_{1m}|$ und ein Abflachen der Singularitäten. Im Gegensatz zu $d=3$ behindern hier zwei Schwierigkeiten die Identifikation der kritischen Exponenten. Zum einen sind die Fluktuationen in $d=2$ so stark, daß selbst eine Mittelung über 14000 MCS im homogenen Fall und 7 Realisationen à 6000 MCS für das inhomogene Feld noch relativ große Schwankungen in den Meßpunkten beinhaltet (die Gittergröße war 110×40). Zum zweiten wächst die parallele Korrelationslänge mit einem Exponenten $\nu_{\parallel} = 2$ an⁸⁰, so daß sich Finite-Size-Effekte bereits sehr früh bemerkbar machen. Dies schränkt den Bereich zur Messung der Exponenten so sehr ein, daß keine gesicherten Aussagen möglich sind, obwohl die Exponenten sowohl für das homogene wie auch das inhomoge-

ne Oberflächenfeld mit der exakten Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells (mit homogenem Oberflächenfeld)^{104,105} übereinzustimmen scheinen.

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß die Zufälligkeit des Oberflächenfeldes generell nur die Lage der Übergänge im Phasendiagramm verschiebt. Es wäre sicherlich sehr interessant, den unordnungsinduzierten Übergang von diskontinuierlicher zu kritischer Benetzung experimentell zu beobachten. So wäre es z.B. beim Wachsen von Adsorbatschichten ein Leichtes, gezielt Verunreinigungsatome auf die Oberfläche zu bringen.

Abschließend sei bemerkt, daß Unordnung im Volumen im Gegensatz zu der hier betrachteten Oberflächenunordnung die kritischen Exponenten der Benetzungsübergänge verändert. Kardar¹¹⁷ und Lipowsky und Fisher¹¹⁸ finden für zufällige Kopplungen im Volumen übereinstimmend ein quadratisches Hineinlaufen der Grenzfläche bei der kritischen Benetzung. Lipowsky und Fisher untersuchten auch den Einfluß zufälliger Volumenfelder h und fanden sowohl für die kritische wie auch die vollständige Benetzung geänderte Exponenten.

5.1 Der Einfluß elastischer Kräfte auf Phasenübergänge.

In den bisherigen Kapiteln wurde, sofern auf Festkörper Bezug genommen wurde, das Kristallgitter lediglich als starrer Träger der Freiheitsgrade betrachtet, die für den Phasenübergang verantwortlich sind. In realen Systemen wird jedoch das Gitter vom Ordnungsparameter beeinflusst, wie das Beispiel der Magnetostriktion zeigt. In Abschnitt 5.3 wird der Einfluß solcher Effekte auf die Benetzungsübergänge untersucht, während 5.4 das Zustandekommen inhomogener Strukturen durch elastische Wechselwirkungen zum Thema hat. Die grundsätzliche Bedeutung einer solchen Kopplung zwischen Ordnungsparameter und Gitter zeigte Rice schon 1954^{119,120}. Er bewies mit allgemeinen thermodynamischen Argumenten, daß eine divergierende spezifische Wärme, wie sie bei einem Phasenübergang 2. Ordnung auftritt, auf einem kompressiblen Gitter notwendig zu einem diskontinuierlichen Phasenübergang führen muß. In der Folgezeit wurde versucht, dies für bestimmte Modelle explizit zu zeigen. Dabei wurden jedoch mit Hinblick auf die Lösbarkeit oft unphysikalische Annahmen gemacht. So verwendete das vieldiskutierte Baker-Essam-Modell¹²¹ beispielsweise ein Gitter, das zwar eine endliche Kompressibilität hatte, aber instabil gegen Scherungen war (Schermodul 0). Erst Mattis und Schultz betrachteten in ihrer Magneto-thermomechanik¹²² ein realistisches Gitter, bei dem sowohl Kompressions- wie Schermodul endlich waren. Allerdings erlaubten sie dann nur eine homogene Verformung des Gitters, womit eine lokale Anpassung des Gitters an den Ordnungsparameter ausgeschlossen war. Unter dieser Annahme fanden sie tatsächlich den vorausgesagten Phasenübergang 1. Ordnung, indem sie ihr Modell auf dasjenige des starren Gitters abbilden konnten und so das mit den Fluktuationen des Ordnungsparameters verbundene Problem nicht

explizit lösen mußten. Den umgekehrten Weg gingen Wagner und Swift¹²³. Sie untersuchten den Einfluß des Phasenübergangs auf die elastischen Konstanten und behandelten dabei die elastischen Freiheitsgrade exakt. Der Ordnungsparameter dagegen wurde nur in Molekularfeldnäherung behandelt, so daß die erst mit divergierender spezifischer Wärme auftretenden Effekte ausblieben.

Larkin und Pikin¹²⁴ blieb es vorbehalten, ein hinreichend realistisches Modell wiederum durch Abbildung auf dasjenige des starren Gitters exakt zu lösen. Durch Ausintegration der elastischen Freiheitsgrade eines isotropen Kristalls gelangten sie zu einer effektiven 4-Spin-Wechselwirkung für den Ordnungsparameter. Damit fanden sie ebenfalls einen Phasenübergang 1. Ordnung; die Größe der Diskontinuität weicht jedoch von derjenigen von Mattis und Schultz ab. Insbesondere verschwindet sie für Flüssigkeiten (mit Schermodul 0). Die einzige Schwäche ihrer Argumentation war die Annahme periodischer Randbedingungen für das Gitter. Renormierungsgruppmethoden bestätigten im folgenden die Ergebnisse von Larkin und Pikin. Sak¹²⁵ und Rudnick, Bergman und Imry¹²⁶ untersuchten die effektive 4-Spin-Wechselwirkung von Larkin und Pikin mit Wilson- Renormierung und bestätigten damit die diskontinuierliche Natur des Phasenübergangs im Falle einer kräftefreien Kristalloberfläche. Für eine festgehaltene Oberfläche dagegen (eingespannter Kristall), fanden sie einen neuen Fixpunkt der Renormierungstransformation mit Exponenten, die im Rahmen der ϵ -Entwicklung mit Fisherrenormierten Exponenten¹²⁷ übereinstimmen. Bergman und Halperin¹²⁸ zeigten schließlich, daß dieser Fixpunkt instabil ist gegen eine elastische Anisotropie. In anisotropen Kristallen werden gewisse elastische Konstanten "weich" und bewirken einen Phasenübergang 1. Ordnung.

5.2 Einfluß auf Phasenübergänge im Volumen

In diesem Abschnitt sollen die eben vorgestellten Ergebnisse im Rahmen einer einheitlichen Theorie sowohl für die freie als auch die feste Oberfläche bestätigt und erweitert werden. Als Modell für die Kopplung zwischen Ordnungsparameter ϕ und Verschiebungsvektor $\underline{u}$ dient die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}\{\phi, \underline{u}\} = \mathcal{H}\{\phi\} + \mathcal{H}_i\{\phi, \underline{u}\} + \mathcal{H}_{el}\{\underline{u}\} \quad (5.1)$$

wobei $\mathcal{H}\{\phi\}$ die reinen Spinfreiheitsgrade beschreibt und erst später für verschiedene Anwendungen spezifiziert werden soll.

$$\mathcal{H}_{el}\{\underline{u}\} = \int d^d x \left\{ \frac{\lambda}{2} (\text{div } \underline{u})^2 + \mu \sum u_{ij}^2 \right\} \quad (5.2)$$

ist die Hamiltonian eines harmonischen isotropen Kristalls mit den durch kT geteilten Lamé-Koeffizienten λ und μ und dem Verzerrungstensor $u_{ij} = (\partial_i u_j + \partial_j u_i)/2$. Die eigentliche Kopplung zwischen ϕ und $\underline{u}$ bewirkt der Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{H}_i\{\phi, \underline{u}\} = -g \int d^d x \phi^n \text{div } \underline{u} , \quad (5.3)$$

der der Einfachheit halber nur von der relativen lokalen Volumenaufweitung $\Delta V/V = \text{div } \underline{u}$ abhängt. Die Kopplungskonstante g bestimmt die Stärke des magnetostriktiven Effektes. Der Exponent n unterscheidet zwei verschiedene Klassen von Systemen : zunächst solche, die wie Magnete invariant sind

gegenüber einer Inversion des Ordnungsparameters $\phi \rightarrow -\phi$ und deshalb $n=2$ verlangen. Dagegen ist $n=1$ notwendig z.B. in binären Legierungen AB, in denen das Atom A größer ist als das Atom B und so die Gitterkonstante in der A-reichen Phase ($\phi > 0$) grösser und in der B-reichen Phase ($\phi < 0$) kleiner ist als in der homogenen Phase ($\phi = 0$). Eine solche lineare Kopplung wurde aus einem mikroskopischen Modell für Wasserstoff-Metall-Legierungen abgeleitet¹²⁹. In diesem Zusammenhang wurde auch das Konzept der elastischen Moden^{129,130} entwickelt, welches ich im folgenden benutzen werde, um eine effektive Spinhamiltonfunktion abzuleiten. Man geht dabei von der Beobachtung aus, daß das Verschiebungsfeld $\underline{u}$ in der Hamiltonfunktion (5.1) nur quadratisch vorkommt und deshalb in der Zustandssumme ausintegriert werden kann. Dabei wird $\text{div } \underline{u}$ in ein vollständiges System von Eigenmoden $\rho_j(x)$ entwickelt, die von der Geometrie des Systems abhängen. Das Spektrum dieser Moden besteht aus 2 Teilen :

- den Bulkmoden ρ_k (Phononen), die ebene Wellen mit einer zur linearen Ausdehnung des Systems kleinen Wellenlänge sind und alle zum entarteten Energieeigenwert $E_b = (\lambda + 2\mu)^{-1}$ gehören.
- und den Makromoden ρ_ℓ , die ebenso wie ihre Energieeigenwerte E_ℓ im allgemeinen von der geometrischen Form des Systems abhängen. Zu ihnen gehört auch die homogene Expansion $\rho_0(x) = V^{-1/2}$, deren Eigenwert E_0 formunabhängig ist. Für eine kräftefreie Oberfläche findet man in drei Dimensionen $E_0 = (\lambda + 2\mu)^{-1}$, während im Falle einer verschiebungsfreien Oberfläche $E_0 = 0$ gilt.

Wenn die Integration über $\underline{u}$ in der Zustandssumme mit Hilfe dieser Eigenfunktionen durchgeführt wird, erhält man für den Ordnungsparameter die effektive Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\} = \tilde{\mathcal{H}}\{\phi\} - \frac{g^2}{2} \sum_{\ell} (\epsilon_{\ell} - \epsilon_b) |\phi_{\ell}^n|^2 \quad (5.4)$$

mit

$$\tilde{\mathcal{H}}\{\phi\} = \mathcal{H}\{\phi\} - \frac{g^2 \epsilon_b}{2} \int d^3x \phi^{2n} . \quad (5.5)$$

Die letzte Gleichung bedeutet lediglich die Renormierung einer Kopplungskonstanten in $\mathcal{H}\{\phi\}$, so daß ich die Tilde über $\tilde{\mathcal{H}}$ in Zukunft wieder weglassen werde. Die ϕ_{ℓ}^n sind die Entwicklungskoeffizienten von ϕ^n nach den Makromoden :

$$\phi^n(x) = \sum_{\ell} \phi_{\ell} \rho_{\ell}(x) . \quad (5.6)$$

Bei der Ableitung von (5.4) wurden keinerlei Annahmen über $\mathcal{H}\{\phi\}$ gemacht. Diese Gleichung stellt daher eine recht allgemeine Ausgangsbasis zur Untersuchung von an Gitter gekoppelten Phasenübergängen dar. Im Gegensatz zu den meisten früheren Arbeiten (Kap.5.1) wurden die elastischen Freiheitsgrade ebenso wie ihre Randbedingungen an der Oberfläche exakt behandelt (keine periodischen Randbedingungen).

Eine wesentliche Vereinfachung erreicht man, indem man von den Makromoden nur die homogene Expansion ρ_0 mitnimmt. Die effektive Hamiltonfunktion schreibt sich dann

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\} = \mathcal{H}\{\phi\} - \frac{V}{2V} (\int d^3x \phi^n)^2 \quad (5.7)$$

mit der Kopplungskonstanten

$$v = g^2(E_0 - E_b) \quad . \quad (5.8)$$

Die Hamiltonian (5.7) ist exakt für alle Ordnungsparameterkonfigurationen, die nicht langsam (auf makroskopischer Skala) variieren. Sie enthält die für den Phasenübergang wesentlichen Fluktuationen¹³¹. Auf die Bedeutung der Makromoden wird weiter unten noch eingegangen werden. Von entscheidender Bedeutung ist die Tatsache, daß die Kopplungskonstante v für die beiden verschiedenen elastischen Randbedingungen verschiedene Vorzeichen hat. Für die kräftefreie Oberfläche erhält man

$$v = \frac{4}{3} \frac{\mu g^2}{(\lambda + 2\mu/3)(\lambda + 2\mu)} \geq 0 \quad , \quad (5.9)$$

während die feste Oberfläche auf

$$v = - \frac{g^2}{(\lambda + 2\mu)} < 0 \quad (5.10)$$

führt. Dies hat entscheidende Konsequenzen für die Natur des Phasenübergangs.

Im folgenden möchte ich für den Fall $n=2$, also magnetostriktiver Systeme, die Resultate von Larkin und Pikin und Sak mittels einer einheitlichen Darstellung reproduzieren, ohne dabei auf Renormierungsmethoden zurückgreifen zu müssen. Die Referenzhamiltonian $\mathcal{H}\{\phi\}$ soll die normale ϕ^4 -Theorie des Volumens repräsentieren :

$$\mathcal{H}\{\phi\} = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{t}{2}\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 \right\} \quad . \quad (5.11)$$

Die Freie Energie, die zur Hamiltonfunktion (5.7) gehört, läßt sich mit einem einfachen Trick auf diejenige des starren Gitters abbilden. Durch die Hilfsintegration über eine Gauß'sche Variable ξ läßt sich nämlich das Quadrat des Integrals in (5.7) linearisieren und man erhält für die Zustandssumme

$$Z = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int D\phi \exp\{-\mathcal{H}(\phi) - \xi^2 + \sqrt{2v/V} \xi \int d^3x \phi^2\} \quad (5.12)$$

Der Effekt der elastischen Kopplung kann also betrachtet werden als eine fluktuierende Temperatur $t = \sqrt{8v/V} \xi$. Die funktionale Integration über den Ordnungsparameter ϕ kann nun durchgeführt werden und führt auf

$$Z = \sqrt{V/\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \exp\{-V(\zeta^2 + f_I(t - \sqrt{8v} \zeta))\} \quad (5.13)$$

Dabei ist $\zeta = \xi/\sqrt{V}$ und $f_I(t)$ ist die Dichte der Freien Energie der ϕ^4 -Theorie. Wegen des Faktors V im Exponenten wird im thermodynamischen Limes die Sattelpunktsnäherung bei Ausrechnung des Integrals exakt und man erhält für die Dichte der Freien Energie $f = -V^{-1} \ln Z$

$$f(t) = 2v e^2 + f_I(t+4ve) \quad , \quad (5.14)$$

wobei die Energiedichte e selbstkonsistent bestimmt wird aus der Gleichung

$$e = e_I(t+4ve) \quad . \quad (5.15)$$

$e_I = -\partial f_I / \partial t$ ist dabei die Energiedichte der ϕ^4 -Theorie.

Die Gleichungen (5.14) und (5.15) beinhalten eine vollständige Abbildung der Theorie des kompressiblen Gitters auf diejenige des starren Gitters, die als bekannt vorausgesetzt werden darf. So hat z.B. die Energiedichte $e_I(t)$ als Funktion von t die in Fig.23 gezeigte Form. Am kritischen Punkt $t=0$ hat sie eine senkrechte Tangente :

$$e_I(t) = e_{\pm} |t|^{1-\alpha_I} \quad , \quad \alpha_I > 0 \quad , \quad t \gtrless 0 \quad . \quad (5.16)$$

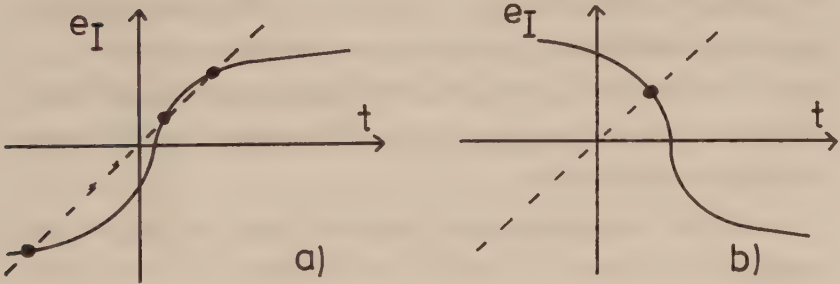


Fig.23

Fig.23a) und b) skizzieren die graphische Lösung der selbstkonsistenten Gleichung (5.15). Dabei zeigt sich besonders deutlich die Bedeutung des Vorzeichens von v und damit der elastischen Randbedingung. Für die kräftefreie Oberfläche ($v>0$, Fig.23a) erkennt man sofort die diskontinuierliche Natur des Phasenübergangs. Eine Abschätzung der Größenordnung der Diskontinuität für Magnete zeigt jedoch, daß die Abweichung vom normalen kritischen Verhalten erst für $|t| < 10^{-6/\alpha}$ sichtbar wird, also

unmeßbar klein ist. Lediglich Materialien mit einer sehr großen Magnetostraktion könnten in den meßbaren Bereich vorrücken. So hat zum Beispiel der Antiferromagnet CoO mit $\Delta V/V \approx 10^{-2}$ eine um den Faktor 1000 größere Magnetostraktion als die üblichen Magnete. Experimentelle Untersuchungen^{132,133} lassen jedoch keine Diskontinuität erkennen.

Fig.23a zeigt, daß es auch für eine nicht divergierende spezifische Wärme zu einem Phasenübergang 1. Ordnung kommen kann, wenn die Energiedichte nur genügend steil verläuft. Das bestätigt wiederum das Ergebnis der Magnetothermomechanik von Mattis und Schultz. Allerdings besteht wegen der inkorrekten Behandlung der elastischen Freiheitsgrade durch diese Autoren die grundsätzliche Diskrepanz in der Kopplungskonstanten v . Deshalb geben Mattis und Schultz die Größe der Diskontinuität falsch an und erkennen insbesondere nicht, daß für Flüssigkeiten ($\mu=0$) das kritische Verhalten unverändert bleibt.

Im Falle der festgehaltenen Oberfläche ($v < 0$) zeigt Fig.23b), daß der Phasenübergang kontinuierlich bleibt. Durch Einsetzen von (5.16) in (5.15) erhält man jedoch ein anderes kritisches Verhalten für die spez. Wärme $c = \partial e / \partial t$:

$$c = |4v|^{-1} \{ 1 - 1/(1-\alpha_I) |4v e_{\pm}|^{-1/(1-\alpha_I)} |t|^{\alpha_I/(1-\alpha_I)} \} \quad (5.17)$$

Sie divergiert nicht mehr, sondern zeigt einen Cusp mit dem Fisher-renormierten Exponenten $\alpha = -\alpha_I/(1-\alpha_I)$ und dem maximalen Wert $|4v|^{-1}$. Auch die übrigen Exponenten werden Fisher-renormiert. Dieses exakte Resultat erweitert die bisher vorliegenden Ergebnisse der ϵ -Entwicklung^{125,126}.

5.3 Der elastische Einfluß auf die Benetzungsübergänge.

Im vorigen Abschnitt wurde der Einfluß der elastischen Wechselwirkung auf magnetostriktive Systeme mit einem Phasenübergang 2. Ordnung im Volumen untersucht. Jetzt sollen wieder Phasenübergänge 1. Ordnung im Volumen betrachtet werden. Dabei soll die Frage gestellt werden, welche Wirkung die Kopplung ans Gitter auf die Benetzungsübergänge an der Oberfläche hat. Dabei werden sowohl die magnetostriktiven Systeme betrachtet, die in (5.3) mit $n=2$ an die Gitteraufweitung koppeln, als auch binäre Systeme mit $n=1$. Die Oberfläche wird als kräftefrei angenommen, so daß $v > 0$. Betrachten wir zunächst die binären Systeme. Als Referenzhamiltonian verwende ich in diesem Fall die Kontinuumsversion der schon zur Monte-Carlo-Simulation verwendeten Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}\{\phi\} = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{t}{2}\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 - h\phi - \delta(z) h_1\phi \right\} \quad (5.18)$$

Für $t < 0$ koexistieren auf der Linie $h=0$ die beiden Phasen $\phi_b = \pm\sqrt{-t/g}$. Durch Einschalten eines Oberflächenfeldes H_1 läßt sich erreichen, daß sich an der Oberfläche eine Schicht der negativen Phase bildet, während das Volumen sich in der positiven Phase befindet. Wie die Monte-Carlo-Simulation gezeigt hat, divergiert die Ausdehnung dieser Schicht für $h_1 \rightarrow h_1^*$ (kritische Benetzung). Vollständige Benetzung läßt sich erreichen auf dem Weg $h_1 < h_1^*$, $h \rightarrow 0$.

Die Gleichung für den Ordnungsparameter in Molekularfeldnäherung mit elastischer Wechselwirkung lautet nach (5.7)

$$\Phi''(z) = -\frac{dV}{d\Phi}, \quad \Phi'(0) = -h_1 \quad (5.19)$$

mit

$$V(\Phi) = -\frac{t}{2}\Phi^2 - \frac{g}{4}\Phi^4 + (h+v\Phi_b)\Phi \quad (5.20)$$

Dabei wurde $\Phi_b = v^{-1} \int d^3x \Phi$ benutzt. Für den Volumenordnungsparameter bekommt man im Falle $h=0$ aus (5.19) und (5.20) $\Phi_b^2 = (v-t)/g$. Der kritische Punkt wird also nach $t_c=v$ verschoben. (5.20) läßt erkennen, daß die elastische Kopplung in die Gleichung für das Profil genauso eingeht wie ein äußeres Volumenfeld. Das bedeutet, daß auch auf der Koexistenzlinie $h=0$ noch ein effektives Feld wirkt, welches das Ablösen der Phasengrenzfläche von der Oberfläche verhindert. Die Benetzungsübergänge werden also bei Gegenwart einer elastischen Wechselwirkung notwendig diskontinuierlich ! In dem Bereich $0 < t < t_c$ nahe dem kritischen Punkt dominieren sogar die elastischen Effekte : dort bildet sich keine scharfe Phasengrenzfläche mehr aus, sondern der Ordnungsparameter steigt monoton auf einer Längenskala $L=v^{-1/2}$ an (Fig. 24). Dieses Bild ist in qualitativer Obereinstimmung

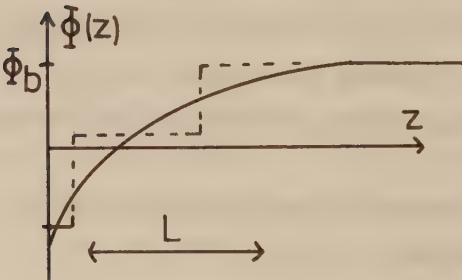
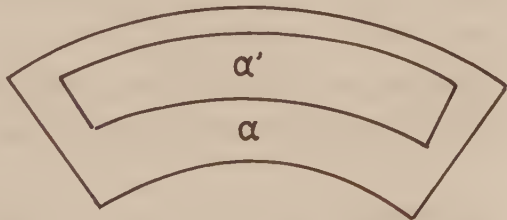


Fig.24: Ordnungsparameterprofil im Bereich $0 < t < t_c$. Die durchbrochene Linie zeigt den Fit von Zabel et al.

mung mit einer Messung von Zabel et al.¹³⁴ an dem System NbH. Dort wurde eine Niobfolie von 300 μ m Dicke mit Wasserstoff beladen und unter die Entmischungstemperatur abgekühlt. Dabei trennte sich der Wasserstoff kohärent in eine dichte α' -Phase und eine verdünnte α -Phase (vgl.Fig.25). Aufgrund der unterschiedlichen Volumenaufweitungen der beiden Phasen krümmte sich der Kristall. Erstaunlicherweise fanden die Autoren mittels Röntgenstreuung auch auf der aufgeweiteten Oberfläche des Kristalls eine dünne Schicht der α -Phase, obwohl diese dort wegen der großen Gitterkonstante energetisch ungünstig sein sollte. Dies legt die Annahme einer Oberflächenbenetzung durch die α -Phase nahe, die durch eine kurzreichweitige Oberflächenwechselwirkung verursacht wird. Interessanterweise lassen sich die Ergebnisse der Messung nicht durch eine scharfe Grenzfläche zwischen den beiden Phasen, sondern nur durch die Annahme einer intermediären Phase verstehen (vgl.Fig.24). Dies könnte gerade ein Fit an die monotone Funktion der Theorie sein.

Fig.25: Der Niobkristall
von Zabel et al.



Leider stimmen die Längenskalen in Theorie und Experiment nicht überein. Zabel et al. finden $L \approx 50 \mu\text{m}$, während eine Abschätzung der Parameter der Theorie $L \approx 100 \text{ \AA}$ ergibt. Eine mögliche Ursache für die Diskrepanz geben die

Autoren selbst : Die Oberfläche des Kristalls war sehr wahrscheinlich nicht mehr in einem kohärenten Zustand; d.h. es haben sich an der Oberfläche Versetzungen gebildet, die Oberfläche war eingerissen, so daß sich die elastischen Spannungen, die das Hineinlaufen der Grenzfläche verhindern, lösen konnten. Dadurch erstreckt sich die α -Phase weiter in das Volumen hinein, als es der kohärente Zustand erlauben würde. Der inkohärente Zustand wird durch die obige Theorie nicht beschrieben. Weitere Untersuchungen an diesem System mit Hinblick auf Benetzung wären deshalb wünschenswert.

Qualitativähnliche Ergebnisse erhält man für die magnetostriktiven Systeme ($n=2$). Als Referenzhamiltonian $\mathcal{H}\{\phi\}$ nehme ich in diesem Fall die ϕ^4 - ϕ^6 -Theorie, an deren Beispiel in Kap.4 die Benetzungsübergänge diskutiert wurden. Aus (5.7) folgt dann für den Ordnungsparameter die Molekularfeldgleichung

$$\phi''(z) = -\frac{dV}{d\phi}, \quad \phi'(0) = c \cdot \phi(0) \quad (5.21)$$

mit

$$V(\phi) = -\frac{1}{2}(\tau - 2v \phi_b^2) \phi^2 + \frac{b}{4} \phi^4 - \frac{g}{6} \phi^6 \quad (5.22)$$

Der Ordnungsparameter im Volumen ist gegeben durch

$$\phi_b^2 = (2g)^{-1} \{b + 2v + \sqrt{(b + 2v)^2 - 4\tau g}\}. \quad \text{Der Phasenübergang im Volumen wird von } \tau^* \text{ (vgl. (4.5)) verschoben nach}$$

$$\tau^{**} = 3(b + 2v)^2 / 16g \quad (5.23)$$

Der Abstand der Grenzfläche von der Oberfläche würde dagegen erst divergieren bei

$$\tau_c = \tau^* + 3vb/2g > \tau^{**} \quad . \quad (5.24)$$

τ_c liegt also schon in der ungeordneten Phase, die Grenzfläche bleibt deshalb auf der Koexistenzlinie τ^{**} in der Nähe der Oberfläche und die Benetzung wird diskontinuierlich¹³⁵. Wegen der geringen Stärke der Magnetostriktion ist dies jedoch ein recht kleiner Effekt. Für $v \ll b$ läßt sich die Größe der Diskontinuität charakterisieren durch

$$\frac{\tau_c - \tau^{**}}{\tau^{**}} \approx v/b \quad . \quad (5.25)$$

v und b lassen sich durch experimentell zugängliche Größen ausdrücken. So ist die Volumenaufweitung gegeben durch

$$\Delta V/V = \text{div } \underline{u} = \frac{g}{\lambda + 2\mu} \phi_b^2 \approx \sqrt{v/K} \phi_b^2 \quad (5.26)$$

wobei $K = \lambda + 2\mu/3$ das durch kT dividierte Kompressionsmodul ist. Die Oberflächenspannung der Grenzfläche ist

$$\sigma \approx \phi_b^2 / \xi \quad (5.27)$$

mit der Korrelationslänge $\xi \approx \sqrt{g/b}$.

Mit Hilfe der Näherungswerte $K = 10^{11} \text{ J/m}^3 / kT$, $\sigma = 10^{-3} \text{ J/m}^2 / kT$, $\Delta V/V = 10^{-5}$ ¹³⁶ und $\xi = 10^{-10} \text{ m}$ schreibt sich (5.25)

$$\frac{\tau_c - \tau^{**}}{\tau^{**}} \approx K(\Delta V/V)^2 \epsilon / \sigma \approx 10^{-6} \quad (5.28)$$

Die elastischen Effekte liegen daher an der Grenze des Meßbaren. Wenn man das logarithmische Gesetz für das Hineinwachsen der Oberflächenschicht zugrundelegt (4.26), erhält man für die maximale Ausdehnung dieser Schicht $\lambda/\xi \approx \ln v/b \approx 10$. Zu beachten ist allerdings, daß die Stärke der Magnetostraktion quadratisch in (5.28) eingeht. Für einige Materialien wie z.B. CoO mit $\Delta V/V = 10^{-2}$ kann das Verhältnis (5.28) die Größenordnung 1 erreichen. Dann sollten die elastischen Effekte sichtbar sein.

Zum Schluß sei noch darauf hingewiesen, daß für Flüssigkeiten wegen des Verschwindens des Schermoduls μ die Kopplungskonstante $v=0$ ist. Die Kompressibilität hätte also für diese Systeme keine Beeinträchtigung des Benetzungsübergangs zur Folge. Allerdings darf nicht vergessen werden, daß die in dieser Arbeit vorgestellten Theorien nur für kurzreichweitige Kräfte Gültigkeit haben. Die langreichweitigen van-der-Waals-Kräfte in Flüssigkeiten modifizieren das Benetzungsverhalten. Gittes und Schick⁹⁵ und Huse⁹⁶ fanden in diesem Fall, daß langreichweitige Wand-Adsorbat Wechselwirkungen den Flüssigkeitsfilm komprimieren und dann ebenfalls zu einer diskontinuierlichen Benetzung führen.

5.4 Erzwungene Domänenbildung

Im letzten Teil dieser Arbeit sollen die Auswirkungen der elastischen Wechselwirkung auf Phasenübergänge 1. Ordnung im Volumen betrachtet werden. Die in 5.1 besprochenen früheren Arbeiten bezogen sich ausschließlich auf Phasenübergänge 2. Ordnung. Im Gegensatz zum vorigen Abschnitt wird jetzt nicht die kräftefreie, sondern die festgehaltene Oberfläche als Randbedingung auferlegt. Das konkurrierende Wechselspiel zwischen den Ordnungstendenzen am Phasenübergang, die mit einer Expansion (oder Kontraktion) des Kristalls verbunden sind, und der restriktiven Randbedingung, die dies verhindern, führen zu einer inhomogenen Struktur im Volumen.

Dabei ist wesentlich, daß die elastische Wechselwirkung zwischen den beiden am Phasenübergang koexistierenden Phasen unterscheiden kann. Wenn z.B. die eine Phase das Gitter expandiert und die andere das Gitter kontrahiert, dann hat ein homogenes Ordnungsparameter aufgrund der Randbedingung eine hohe elastische Energie. Diese kann durch die Bildung von Domänen abgesenkt werden : die Domänen der einen Phase kontrahieren und die anderen expandieren das Gitter, so daß nach außen keine Volumenänderung auftritt. Interessanterweise ist diese Domänenstruktur nicht nur genau auf sondern auch noch in einer Umgebung der Koexistenzlinie stabil. Dieses Phänomen tritt sowohl für binäre ($n=1$) wie auch magnetostriktive Systeme ($n=2$) auf. Ausführlich diskutieren möchte ich es an Hand der ersteren. Für die magnetostriktiven Systeme wird weiter unten eine Zusammenfassung der Resultate gegeben.

Zunächst möchte ich wieder die durch Vernachlässigung der Makromoden vereinfachte Hamiltonfunktion (5.7) mit $n=1$ betrachten. Wegen der re-

striktiven Randbedingung $\underline{u}=0$ ist die elastische Kopplungskonstante $v=-g^2 E_b$ jetzt negativ. Die Referenzhamiltonian $\mathcal{H}\{\phi\}$ sei die ϕ^4 -Theorie mit einem äußeren Volumenfeld h (5.18) ohne den Oberflächenterm, der für die Volumeneigenschaften keine Rolle spielt. Unterhalb der kritischen Temperatur ($t < 0$) koexistieren auf der Linie $h=0$ die beiden Phasen $\phi = \pm m_I(t)$. Die mit der Hamiltonfunktion (5.7) gebildete Zustandssumme läßt sich wieder wie in 5.2 durch Integration über eine Gauß'sche Variable auf diejenige der reinen ϕ^4 -Theorie abbilden. Man erhält so für die Dichte der Freien Energie

$$f(t, h) = v m^2/2 + f_I(t, h+vm) \quad (5.29)$$

und

$$m = m_I(t, h+vm) \quad (5.30)$$

Dabei ist f_I die Dichte der Freien Energie der ϕ^4 -Theorie und $m_{(I)} = -\partial f_{(I)} / \partial h$ der jeweilige Ordnungsparameter.

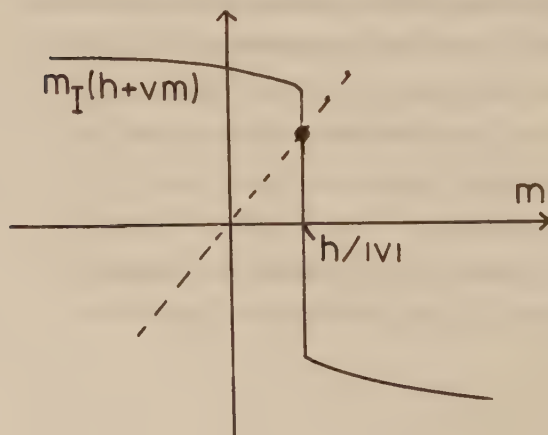


Fig.26: Graphische Lösung der Gleichung (5.30)

(5.30) läßt sich wieder leicht graphisch lösen. Fig.26 zeigt den generischen Verlauf von $m_I(h)$ unterhalb der kritischen Temperatur. Von wesentlicher Bedeutung ist das vertikale Stück bei $h=0$, wo der Ordnungsparameter von $+m_I(t)$ nach $-m_I(t)$ springt. In dem Bereich

$|h| \leq h_{\max} = |v|m_I(t)$ erhält man sofort

$$m(t, h) = h/|v|. \quad (5.31)$$

Der mittlere Ordnungsparameter ist eine lineare Funktion des äußeren Feldes und die zugehörige Suszeptibilität $\chi = \partial m / \partial h$ ist nicht von h und t abhängig :

$$\chi = 1/|v| \quad . \quad (5.32)$$

Bei $h_{\max}$ hat χ eine Diskontinuität proportional zu $1/|v|$.

(5.31) bedeutet nicht, daß der Ordnungsparameter lokal diesen Wert hat.

Vielmehr beschreibt (5.31) den über das Volumen gemittelten Ordnungsparameter, der durch die relative Größe der Domänen mit $\phi = \pm m_I(t)$ bestimmt ist. Damit wird das in Fig.27 gezeigte Phasendiagramm motiviert : homogene Phasen gibt es nur außerhalb des durch $\pm h_{\max}$ eingeschlossenen Gebietes. Dringt man in dieses Gebiet ein, entstehen in der homogenen Phase Domänen der anderen Phase, die für $h \rightarrow 0$ wachsen und schließlich bei $h=0$ den gleichen Volumenanteil annehmen. Der diskontinuierliche Phasenübergang bei $h=0$ ist also aufgrund der elastischen Wechselwirkung aufgespalten in zwei kontinuierliche Phasenübergänge bei $h = \pm h_{\max}$! Durch Einsetzen von (5.31) in (5.29) erhält man die Freie Energie in dem durch $h_{\max}$ begrenzten Gebiet.

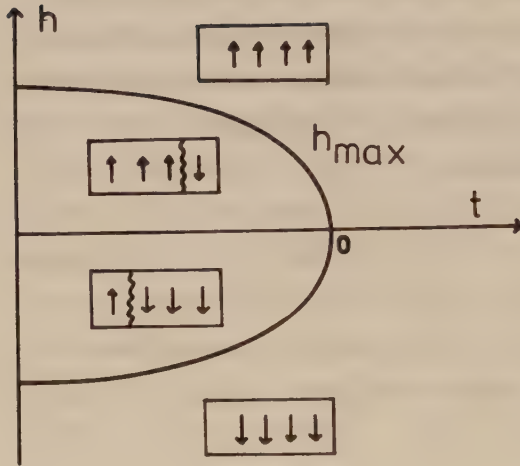


Fig.27: Phasendiagramm.
Nur außerhalb des durch $h_{\max}$ begrenzten Gebiets ist das System homogen. Innerhalb trennt es sich in Domänen.

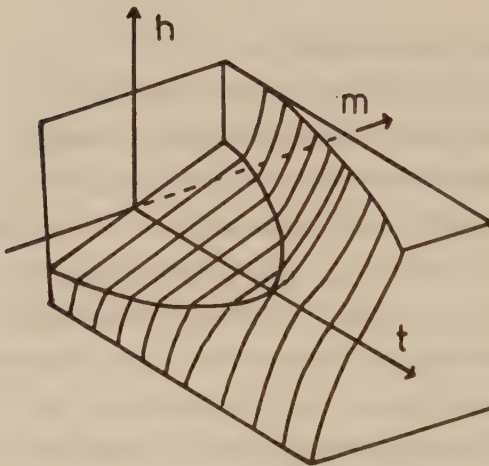


Fig.28: Zustandsfläche
im (t, h, m) -Raum. Die
elastische Kopplung
hat das Zweiphasenge-
biet aus der $h=0$ -Ebe-
ne herausgedreht.

$$f(t,h) = f_I(t,0) - h^2/2|v| \quad . \quad (5.33)$$

Die Zustandsfläche im (t,h,m) -Raum ist in Fig.28 abgebildet. Man erkennt, daß das durch $h_{\max}$ begrenzte Gebiet genau das bei einem Phasenübergang 1. Ordnung immer auftretende Zweiphasen-Koexistenzgebiet ist.

Aufgrund der elastischen Kopplung ist es jedoch aus der $h=0$ -Ebene herausgedreht und hat eine flächige Projektion auf die h - t -Ebene, nämlich Fig.27. Die elastische Wechselwirkung erlaubt also eine Durchquerung des Zweiphasengebietes durch Variation eines intensiven Parameters. Diese der Thermodynamik zunächst widersprechende Aussage liegt an der unendlich langreichweitigen Natur der elastischen Wechselwirkung : die restriktive Randbedingung an der Oberfläche ist auch noch tief im Volumen spürbar und erzwingt dort eine inhomogene Struktur.

Die Form des Zweiphasengebietes ändert sich durch die Drehung nicht wesentlich : in der Nähe des kritischen Punktes $t=0$ gilt $h_{\max} \sim m_I(t) \sim (-t)^{\beta_I}$. Der Ordnungsparameter in den Domänen verschwindet also mit dem üblichen Exponenten β_I des Isingmodells. Der Exponent der Suszeptibilität wird dagegen ähnlich der Fisher-Renormierung verändert. Aus (5.30) erhält man oberhalb T_c

$$\chi(t) = \chi_I(t)/(1+|v| \chi_I(t)) \quad . \quad (5.34)$$

χ_I divergiert für $t \rightarrow 0$ wie $t^{-\gamma_I}$ mit $\gamma_I > 0$. χ dagegen bleibt am kritischen Punkt endlich und hat nur eine rechtsseitige Cusp-Singularität :

$$\chi(t) \sim 1/|v| - v^{-2} \chi_I(t)^{-1}, \quad \gamma = -\gamma_I \quad . \quad (5.35)$$

Wie aus (5.34) ersichtlich ist, ist der mit der Kopplung v verbundene Crossoverexponent gerade der Exponent γ_1 . Dies stimmt überein mit dem allgemeinen Crossoverexponenten für langreichweitige Wechselwirkungen¹³⁷ im Grenzwert unendlicher Reichweite.

Gleichung (5.31) gibt den Mittelwert des Ordnungsparameters und damit der Volumenanteile der beiden Phasen an. Um die Fluktuationen der Volumenanteile um ihren Mittelwert abzuschätzen, betrachte ich ein d -dimensionales kubisches System der Kantenlänge L , das parallel zu einer Seitenfläche durch eine flache Grenzfläche in zwei Domänen unterteilt ist. Der Mittelwert der Grenzflächenposition l_0 in einem Feld h folgt dann aus (5.31) zu

$$l_0 = \frac{L}{2} (1 + h/h_{\max}) \quad . \quad (5.36)$$

Durch Auslenkung der Grenzfläche nach $l = l_0 + \Delta l$ ändern sich die Volumenanteile der beiden Domänen. Die Hamiltonfunktion (5.7) verlangt dazu die Energie

$$\Delta \mathcal{H} = \frac{1}{2} (L/L_0)^d (\Delta l/L)^2 \quad (5.37)$$

mit der neuen Längenskala

$$L_0 = (4|v|m_1)^{-1/d} \approx \{K(\Delta V/V)^2\}^{-1/d} \quad . \quad (5.38)$$

In drei Dimensionen erhält man mit den oben benutzten Zahlenwerten $L_0 \approx 1000 \text{ \AA}$.

Mit dem Gewicht $\exp\{-\Delta\mathcal{K}\}$ bekommt man eine mittlere Schwankung der Volumenanteile von

$$\sqrt{\langle \Delta k^2 \rangle} = L_0^{d/2} L^{(2-d)/2} \quad . \quad (5.39)$$

Die Schwankungen verschwinden deshalb für dreidimensionale Systeme im thermodynamischen Limes. L_0 bestimmt die minimale Größe für das Auftreten der Domänenstruktur. Für $L=L_0$ werden die Fluktuationen der Domänengrößen so groß wie die Probe selbst.

5.5 Makromoden.

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, welche Bedeutung die bisher vernachlässigten Makromoden für die inhomogene Struktur bei festgehaltener Oberfläche haben. Es stellt sich heraus, daß die in den vorherigen Abschnitten mit der vereinfachten Hamiltonfunktion (5.7) diskutierte Domänenstruktur das absolute Minimum der Freien Energie darstellt. In Flüssigkeiten ist dies auch der einzig mögliche Zustand. In Kristallen dagegen beschreibt die Domänenstruktur einen inkohärenten Zustand. Die Domänen der beiden Phasen haben eine unterschiedliche Gitterkonstante; daher muß der Kristall an den Phasengrenzen zerbrechen. Von der Theorie der Wasserstoff-Metall-Legierungen her¹³⁰ ist es wohlbekannt, daß die Kohärenzspannungen zum Zerbrechen des Gitters so groß sind, daß der Kristall auch weit unterhalb der kritischen Temperatur T_c in einem kohärenten, metastabilen Zustand vorliegen kann, in dem es keine scharfen Phasengrenzen, sondern einen auf makroskopischer Skala langsam variierenden Ordnungsparameter gibt. Diese makroskopischen Ordnungsparameterver-

teilungen lassen sich gerade nach den Makromoden entwickeln. Wie weit sich die Freie Energie dadurch gegenüber dem homogenen Zustand absenken läßt, wird im folgenden explizit an Hand eines kugelförmigen Systems untersucht. In einer Kugel mit Radius R und Polarkoordinaten $x=(r,\theta,\phi)$ sind die Makromoden gerade die Kugelfunktionen¹³⁰

$$\rho_{\ell m}(x) = \sqrt{(2\ell+3)/R} \ (r/R)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad . \quad (5.40)$$

Die elastischen Eigenwerte bei festgehaltener Oberfläche sind unabhängig von m :

$$E_\ell = E_b \{1 - (\ell+1)\mu/(\ell\lambda+(3\ell+1)\mu)\} \quad . \quad (5.41)$$

Den Index m werde ich im folgenden unterdrücken. Wenn man den Ordnungsparameter nach diesen Eigenfunktionen entwickelt,

$$\phi(x) = \sqrt{V} \sqrt{-t/g} \sum_{\ell} n_{\ell} \rho_{\ell}(x) \quad (5.42)$$

und in die vollständige Hamiltonfunktion (5.4) einsetzt, findet man für die Freie Energie in Molekularfeldnäherung

$$\begin{aligned} f\{n\} &= \mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\}/(V \ t^2/4g) \\ &= -2 \sum_{\ell} \{1+|v|/t \ (1-E_{\ell}/E_b)\} n_{\ell}^2 - 4|v|/t \cdot n_0 \cdot h/h_{\text{max}} \\ &\quad + \sum_{\ell_1 \dots \ell_4} t_{\ell_1 \dots \ell_4} n_{\ell_1 \dots \ell_4} \quad . \end{aligned} \quad (5.43)$$

verschiedenen Temperaturen gezeigt. Zur Minimierung der Freien Energie (5.43) wurden dabei die ersten acht axialen ($m=0$) Moden $\rho_\ell(x)$, $\ell=0,\dots,7$ mitgenommen. Bei $h=0$ sind nur die ungeraden Moden angeregt.

t	η_1	η_3	η_5	η_7	$f(h=0)/ f_0(h=1) $
t_7	0	0	0	0	0
t_5	$4 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	-.075	$-2 \cdot 10^{-5}$
t_3	10^{-3}	-10^{-2}	.06	-.13	$-3 \cdot 10^{-4}$
t_1	$9 \cdot 10^{-3}$	-.26	.12	-.02	$-3 \cdot 10^{-3}$
t_0	.59	-.20	.06	-.07	-.08
$-4v/3$	.64	-.21	.06	-.07	-.13

Bei der Temperatur t_7 sind alle Entwicklungskoeffizienten 0. Darunter beginnt erwartungsgemäß η_7 zu wachsen. Die anderen Koeffizienten sind klein, aber wegen der nichtdiagonalen Kopplungen $t_\ell \dots_\ell$ von 0 verschieden. Unterhalb jeder der folgenden Spinodaltemperaturen wächst der Koeffizient der zugehörigen Mode, während die höheren Moden wieder abnehmen. Eine wesentliche Absenkung der Freien Energie wird erst durch die $\ell=1$ Mode unterhalb ihrer Spinodaltemperatur erreicht.

Fig.29 zeigt den Ordnungsparameter als Funktion von Radius und Polarwinkel bei $h=0$ und $t/|v|=-1.33$ unterhalb der Spinodaltemperatur $t_1/|v|=-0.4$ (der Parameter μ/λ wurde hier und im folgenden gleich 1 gesetzt). Die Dominanz der $\ell=1$ Mode äußert sich in dem im wesentlichen linearen Anstieg des Ordnungsparameters entlang der z-Achse.

Wenn das äußere Feld h eingeschaltet wird, beginnt die homogene Mode η_0 zu wachsen, während die Entwicklungskoeffizienten der anderen Moden abnehmen.

Fig.29: Makromoden in der Kugel



Bei einem Feld $h_s(t)$ schließlich ist das System in einem homogenen Zustand : Nur noch n_0 ist von 0 verschieden und die Freie Energie ist gleich der der homogenen Lösung (d.h. des Minimums der Freien Energie bzgl. eines homogenen Ordnungsparameters). Fig.30 zeigt die Freie Energie der Makromoden als Funktion von h bei verschiedenen Temperaturen zusammen mit den Freien Energien der homogenen und der Domänenlösung. Sie liegt immer deutlich über der letzteren. Gegenüber dem homogenen Ordnungsparameter gibt es jedoch für $h < h_s(t)$ eine Energieabsenkung. $h_s(t)$ definiert im h - t -Diagramm eine Spinodale, bei der die homogene Lösung instabil wird. Der Phasenübergang bei $h_s(t)$ scheint kontinuierlich zu sein, obwohl die Kurve $f(h)$ dort und auch an anderen Stellen kleine, in den Bildern nicht sichtbare Knicke hat. Dies liegt wahrscheinlich daran, daß nur eine endliche Anzahl von Moden mitgenommen wurde.

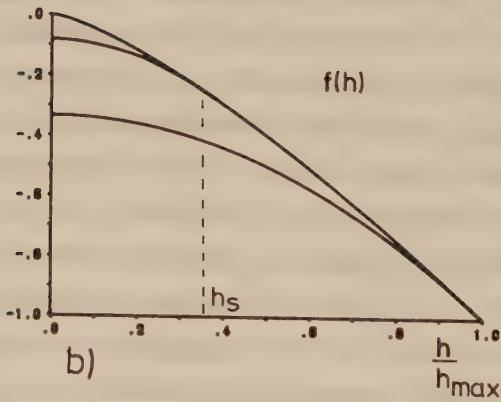
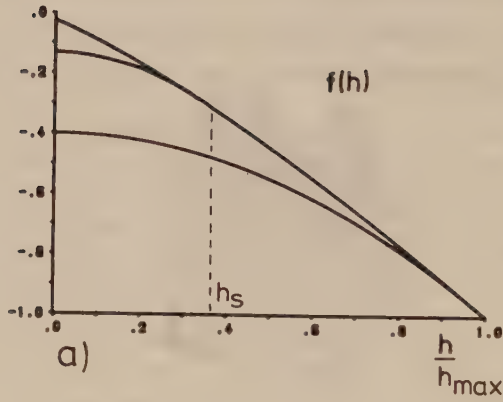
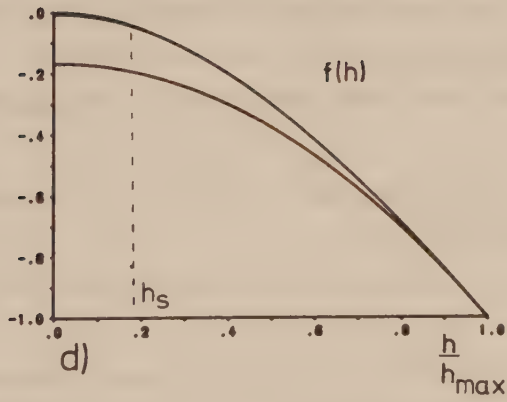
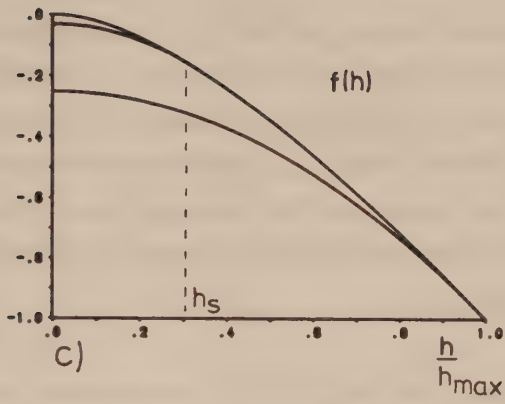


Fig.30: Freie Energien der homogenen-, Makromoden- und Domänenlösung (jeweils von oben nach unten) bei verschiedenen Temperaturen:
a) $t = -4|v|/3$ b) $t = -|v|$ c) $t = -2|v|/3$ d) $t = -2|v|/5$



5.6 Domänenstruktur in magnetostriktiven Systemen.

Magnetostriktive Systeme, die mit $n=2$ in der Wechselwirkungshamiltonian (5.3) an die elastische Volumenaufweitung $\text{div } u$ gekoppelt sind, haben eine zu denen im vorigen Abschnitt behandelten binären Systemen recht ähnliche Domänenstruktur bei festgehaltener Oberfläche. Ich möchte mich deshalb darauf beschränken, die Ergebnisse für ein konkretes Modell anzugeben, nämlich die schon in Kap.4 betrachtete ϕ^4 - ϕ^6 -Theorie mit der Referenzhamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(\phi) = \int d^3 \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\tau}{2} \phi^2 - \frac{b}{4} \phi^4 + \frac{g}{6} \phi^6 \right\} \quad . \quad (5.47)$$

Die Landaukoeffizienten τ und b sollen von Temperatur T und Magnetfeld H abhängen. Dann beschreibt dieses Modell einen Antiferromagneten mit einem trikritischen Punkt bei $\tau(T_t, H_t) = 0 = b(T_t, H_t)$. Für $b > 0$ hat es einen Phasenübergang 1. Ordnung bei $\tau^* = 3b^2/16g$. Bei Ankopplung der elastischen Freiheitsgrade erhält man aus der effektiven Hamiltonfunktion (5.7) wieder eine Aufspaltung dieser Koexistenzlinie in zwei Phasenübergänge 2. Ordnung bei

$$\tau_{\min} = 3(b^2 - 4b|v| - 12v^2)/16g \quad (5.48)$$

und

$$\tau_{\max} = 3(b + 2|v|)^2/16g \quad (5.48b)$$

Fig.31: Phasendiagramm
eines Antiferromagneten
mit Kopplung ans Gitter
und restriktiver Rand-
bedingung

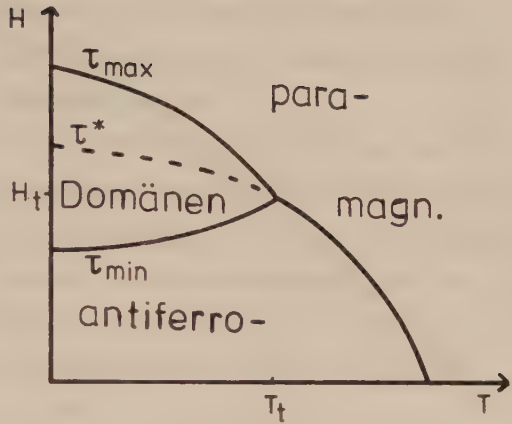


Fig.31 zeigt das Phasendiagramm. In dem Bereich zwischen $\tau_{\min}$ und $\tau_{\max}$ gibt es eine Domänenstruktur zwischen antiferro- und paramagnetischen Phasen. Dieser Bereich kann wieder als Projektion eines gedrehten Zweiphasengebietes aufgefaßt werden. Die thermodynamischen Größen verhalten sich in diesem Gebiet ähnlich wie bei den binären Systemen. So ist die Freie Energie einfach eine quadratische Funktion der Temperatur τ

$$f(\tau) = - (\tau_{\max} - \tau) / 8 |v| \quad (5.49)$$

und der mittlere Ordnungsparameter eine lineare Funktion von τ :

$$m(\tau) = 2g(\tau_{\max} - \tau) / (3|v|(b+2|v|)) \quad (5.50)$$

Die analoge Größe zur Suszeptibilität χ bei den binären Systemen ist hier die spezifische Wärme $c = -\partial^2 f / \partial \tau^2$. Sie ist konstant im Zweiphasengebiet :

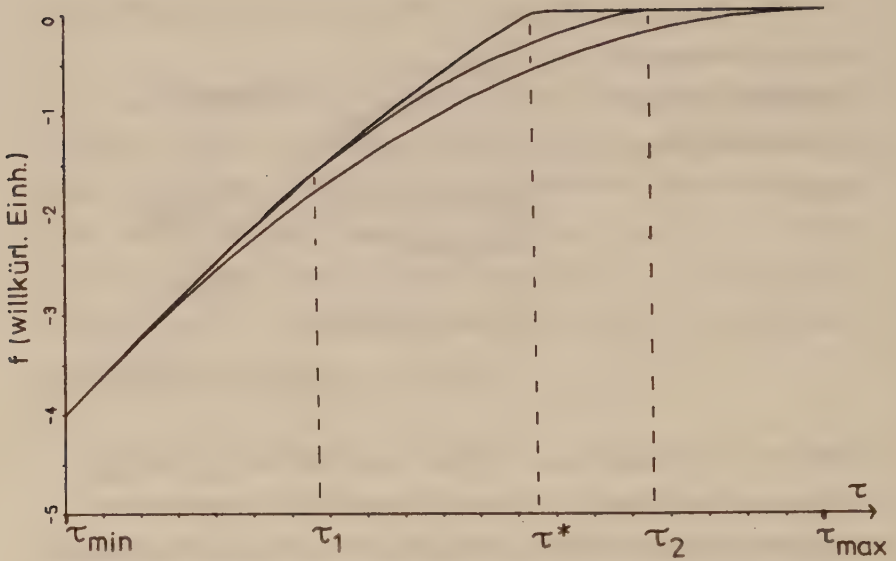


Fig.32: Freie Energien der homogenen-, Makromoden- und Domänenlösung
(von oben nach unten) in einem Antiferromagneten

$$\zeta = 1/4|v| \quad . \quad (5.51)$$

Durch Anwendung des Gauß-Tricks erhält man wieder wie in 5.2 eine Fisher-Renormierung der trikritischen Exponenten. Sie ersetzt hier die Renormierung des Exponenten γ bei den binären Systemen. Natürlich gibt es auch bei den magnetostriktiven Systemen den kohärenten metastabilen Zustand, der durch die Makromoden beschrieben wird. Fig.32 zeigt das Ergebnis der Minimierung der Freien Energie bezgl. der ersten 4 Makromoden $\rho_\ell(x)$, $\ell=0,\dots,3$, in einer Kugel. Gegenüber dem homogenen Zustand gibt es wieder eine deutliche Energieabsenkung. Die Phasenübergänge an den Spinodalen τ_1

und τ_2 scheinen ebenfalls 2. Ordnung zu sein, denn das Einmünden der Freien Energie der Makromodenlösung in diejenige der homogene Lösung wird umso glatter, je mehr Moden mitgenommen werden.

Elastische Einschränkungen der betrachteten Art wurden von Hubert¹³⁸ als mögliche Ursache für die Beobachtung von Domänen in Antiferromagneten angegeben. Denn im Gegensatz zu Ferromagneten gibt es hier keine langreichweitige Dipolwechselwirkung, die zur Entstehung von Domänen Anlaß geben würde. Die notwendige restriktive elastische Randbedingung könnten in einem Polykristall die auf die Oberfläche eines Kristallites wirkenden Kräfte der anderen Kristallite sein.

Gann und Zhukov¹³⁹ haben auf die Möglichkeit von deformationsinduzierten Domänen in anisotropen Antiferromagneten hingewiesen. Sie betrachteten einen Antiferromagneten mit einer "leichten Ebene" in einem äußeren Magnetfeld. Mit Hilfe der vereinfachenden Annahme, daß der Ordnungsparameter nur von einer Koordinate z abhängt und daß u_{zz} die einzige nichtverschwindende Komponente des Verzerrungstensors ist, fanden sie eine stabile Domänenstruktur, wenn die Verschiebung am Rand der Probe $z=\pm L$ konstant gehalten wird: $u_z(z=\pm L)=\pm u_0$. Die Domänen unterscheiden sich in der Orientierung der antiferromagnetischen Ordnung. Die Volumenanteile der beiden Phasen und die Freie Energie sind lineare Funktionen von u_0 . Trotz der unphysikalischen Beschränkung auf nur eine Komponente des Verzerrungstensors ähneln diese Ergebnisse den in den vorhergehenden Abschnitten geschilderten Phänomenen. Dies nährt die Hoffnung auf eine allgemeinere Bedeutung und physikalische Realisierung der an Hand der einfachen Modelle diskutierten Domänenbildung.

Literaturverzeichnis

- 1) K.G. Wilson, Phys.Rev. B4, 3174 und 3184 (1971)
- 2) K.G. Wilson, J. Kogut, Phys.Rep. 12c, 75 (1974)
- 3) L.D. Landau, E.M. Lifschitz : Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd.5, Akademie Verlag, Berlin 1979
- 4) H.E. Stanley : Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press 1971
- 5) L.P. Kadanoff, Rev.Mod.Phys. 39, 395 (1967)
- 6) L. Onsager, Phys.Rev. 65, 117 (1944)
- 7) L. Onsager, B. Kaufman, Phys.Rev. 76, 1232, 1244 (1947)
- 8) H.N.V. Temperley, in : Phase Transitions and Critical Phenomena Bd.1, Hrsg. C. Domb, M.S. Green, London, New York 1972
- 9) S.K. Ma : Modern Theory of Critical Phenomena, Benjamin 1976
- 10) P. Pfeuty, G. Toulouse : Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena, Wiley 1977
- 11) E. Brézin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, in : Phase Transitions and Critical Phenomena Bd.6, Hrsg. C. Domb, M.S. Green, London, New York 1976
- 12) D.J. Amit : Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena, New York 1978
- 13) H. Wagner, Acta Physica Austriaca, Suppl. XVIII, 543 (1977)
- 14) T.W. Burkhardt, J.M.J. van Leeuwen : Real Space Renormalization, Springer 1982
- 15) R. Lipowsky, Phys.Bl. 39, 387 (1983)
- 16) M.E. Fisher, in : Proceedings Stellenbosch, Springer 1982

- 17) D.R. Nelson, M.E. Fisher, Ann.Phys. 91, 226 (1975)
- 18) H.J. Maris, L.P. Kadanoff, Am.J.Phys. 46, 652 (1978)
- 19) K.G. Wilson, Sci.Am., Aug. 1979
- 20) P.C. Hohenberg, A. Aharony, B.I. Halperin, E.D. Siggia, Phys.Rev. B13, 2986 (1976)
- 21) A. Aharony, P.C. Hohenberg, Phys.Rev. B13, 3081 (1976)
- 22) C. Bervillier, Phys.Rev. B14, 4964 (1976)
- 23) K. Binder, in : Phase Transitions and Critical Phenomena Bd.8,
Hrsg. C. Domb, J. Lebowitz, New York 1978
- 24) D.L. Mills, Phys.Rev. B3, 3887 (1971)
- 25) K. Binder, P.C. Hohenberg, Phys.Rev. B6, 3461 (1972)
- 26) T.C. Lubensky, M.H. Rubin, Phys.Rev. B11, 4533 und B12, 3885 (1975)
- 27) A.J. Bray, M.A. Moore, J.Phys.A:Math.Gen. 10, 1927 (1977)
- 28) H.W. Diehl, S. Dietrich, Z.Phys. B42, 65 (1981) und B50, 117 (1983)
- 30) H.W. Diehl, S. Dietrich, Physics Lett. 80A, 408 (1980)
- 31) H.W. Diehl, S. Dietrich, Phys.Rev. B24, 2878 (1981)
- 32) H.W. Diehl, J.Appl.Phys. 53, 7914 (1982)
- 33) H.W. Diehl, in : Phase Transitions and Critical Phenomena
Bd.10, Hrsg. C. Domb, J. Lebowitz, New York 1986
- 34) H.W. Diehl, E. Eisenriegler, Phys.Rev. B30, 300 (1984)
- 35) H.W. Diehl, S. Dietrich, E. Eisenriegler, Phys.Rev. B27, 2937 (1983)
- 36) R. Symanzik, Nucl.Phys. (FS3) 190B, 1 (1981)
- 37) K. Ohno, Y. Okabe, Prog.Theor.Phys. 70, 1226 (1983)
- 38) R. Lipowsky, H. Wagner, Z.Phys. B42, 355 (1981)
- 39) T.W. Burkhardt, E. Eisenriegler, Phys.Rev. B16, 3213 (1977)

- 40) R.J. Celotta, D.T. Pierce, G.C. Wang, S.D. Bader, G.P. Felcher,
Phys.Rev.Lett. 43, 728 (1979)
- 41) S.F. Alvarado, M. Campagna, H. Hopster, Phys.Rev.Lett. 48, 51 (1982)
- 42) D. Weller, S.F. Alvarado, W. Gudat, K. Schröder, M. Campagna,
Phys.Rev.Lett. 54, 1555 (1985)
- 43) C. Rau, S. Eichner, Phys.Rev.Lett. 47, 939 (1981)
- 44) C. Rau, J. Magn. & Magn.Mater. 30, 141 (1982)
- 45) Unordnungsphänomene in Festkörpern, Ferienkurs 1985 der KFA Jülich
- 46) J.L. v.Hemmen, I. Morgenstern (Hrsg.) : Heidelberg Colloquium on Spin
Glases, Lecture Notes in Physics Bd. 192, Springer 1983
- 47) M.N. Barber, in : Phase Transitions and Critical Phenomena Bd.8,
Hrsg. C. Domb, J.L. Lebowitz, New York 1983
- 48) V. Privman, M.E. Fisher, J.Stat.Phys. 33, 385 (1983)
- 49) E. Eisenriegler, K. Binder, K. Kremer, J.Chem.Phys. 77, 6296 (1982)
- 50) E. Eisenriegler, J.Chem.Phys. 79, 1052 (1983)
- 51) E. Eisenriegler, J.Chem.Phys. 81, 4666 (1984)
- 52) G. Dresselhaus, I.A. Howard, B. Wassermann, M.S. Dresselhaus, H.J. Zeiger,
in : Many Body Phenomena at Surfaces, Hrsg. D. Langreth, H. Suhl,
London 1984
- 53) J.C. Measor, K.K. Afzulpurkar, Philos.Mag. 10, 817 (1984)
- 54) M.R. Shannaberger, Phys.Rev.Lett. 43, 1964 (1979)
- 55) B.C. Sales, J.E. Turner, M.B. Maple, Phys.Rev.Lett. 44, 586 (1980)
- 56) K. Stierstadt, Phys.Bl. Juli 1978
- 57) K. Binder, P.C. Hohenberg, IEEC Transact.Magn., MAG-12 (1976)
- 58) K. Binder, D.P. Landau, Surf.Sci. 61, 577 (1976)

- 59) S. Dietrich, H. Wagner, Phys.Rev.Lett. 51, 1469 (1983),
Z.Phys. B56, 203 (1984),
Z.Phys. B59, 35 (1985)
- 60) G. Gompper, Z.Phys.B56, 217 (1984) und Preprint (1986)
- 61) G. Gompper, H. Wagner, Z.Phys. B59, 193 (1985)
- 62) H. Dosch, B.W. Batterman, D.C. Wack, Preprint (1986)
- 63) Y.Y. Goldschmidt, D. Jasnow, Phys.Rev. B29, 3990 (1984)
- 64) H.W. Diehl, G. Gompper, W. Speth, Phys.Rev. B31, 5841 (1985)
- 65) C.A. Wilson, J.Phys.C 13, 925 (1980)
- 66) M. Kikuchi, Y. Okabe, Prog.Theor.Phys. 73, 32 (1985)
- 67) Y. Okabe, M. Kikuchi, K. Ohno, erscheint in Prog. Theor. Phys. (1986)
- 68) D.P. Landau, Phys.Rev. B14, 255 und B13, 2997 (1976)
- 69) K. Binder, D.P. Landau, Phys.Rev.Lett. 52, 318 (1984)
- 70) H.B. Tarko, M.E. Fisher, Phys.Rev. B11, 1217 (1975)
- 71) B.M. McCoy, T.T. Wu, Phys.Rev. 162, 436 (1967)
- 72) E. Barouch, B.M. McCoy, T.T. Wu, Phys.Rev.Lett.31, 1409 (1973)
- 73) R. Lipowsky, Phys.Rev.Lett. 49, 1575 (1982)
- 74) R. Lipowsky, J.Appl.Phys. 55, 2485 (1984)
- 75) R. Lipowsky, W. Speth, Phys.Rev. B28, 3983 (1983)
- 76) R. Lipowsky, Z.Phys. B55, 345, 355 (1984)
- 77) D.M. Kroll, R. Lipowsky, Phys.Rev. B28, 6435 (1983)
- 78) R. Lipowsky, Phys.Rev.Lett. 52, 1429 (1984)
- 79) H. Nakanishi, M.E. Fisher, Phys.Rev.Lett. 49, 1565 (1982)
- 80) M.E. Fisher, J.Stat.Phys. 34, 667 (1984)
- 81) R. Lipowsky, Phys.Rev. B32, 1731 (1985)
- 82) R. Lipowsky, J.Phys.A: Math.Gen. 18, L585 (1985)

- 83) R. Pandit, M. Wortis, Phys.Rev. B25, 3226 (1982)
- 84) R. Lipowsky, G. Gompper, Z.Phys. B29, 5213 (1984)
- 85) W. Speth, Z.Phys. B61, 325 (1985)
- 86) W. Speth, Z.Phys. B51, 361 (1983)
- 87) R.P. Huebener: Magnetic Flux Structures in Superconductors, Springer 1979
- 88) D. Saint-James, E.J. Thomas, G. Sarma: Type II Superconductors, Pergamon Press 1969
- 89) H.J. Fink, R.D. Kessinger, Phys.Rev. 140, A1937 (1965)
- 90) G.P. Felcher, R.T. Kampwirth, K.E. Gray, R. Felici, Phys.Rev.Lett. 52, 1539 (1984)
- 91) S. Dietrich, M. Schick, Phys.Rev. B31, 4718 (1985)
- 92) S. Dietrich, M.P. Nightingale, M. Schick, Phys.Rev. B32, 3182 (1985)
- 93) S. Dietrich, M. Schick, erscheint in Phys.Rev. B33 (1986)
- 94) D.M. Kroll, T.M. Meister, Phys.Rev. B31, 392 (1985)
- 95) D.A. Huse, Phys.Rev. B29, 6985 (1984)
- 96) F.T. Gittes, M. Schick, Phys.Rev. B30, 209 (1984)
- 97) J.W. Cahn, J.Chem.Phys. 66, 3667 (1977)
- 98) D.W. Pohl, W.I. Goldberg, Phys.Rev.Lett. 48, 1111 (1982)
- 99) V.S. Sundaram, R.S. Alben, W.D. Robertson, Surf.Sci. 46, 563 (1974)
- 100) E.G. McRae, R.A. Malik, Surf.Sci. 148, 551 (1984)
- 101) J.L.M. Frenken, J.F. van der Veen, Phys.Rev.Lett. 54, 134 (1985)
- 102) Y. Carmi, S.G. Lipson, E. Polurak, Phys.Rev.Lett. 54, 2042 (1985)
- 103) Einen Übersichtsartikel über Wetting-Phänomene haben geschrieben D.E. Sullivan, M.M. Telo da Gama, in Fluid Interfacial Phenomena, Hrsg. C.A. Croxton, Wiley, New York 1985

- 104) D.B. Abraham, Phys.Rev.Lett. 44, 1165 (1980)
- 105) D.B. Abraham, J.Phys.A: Math.Gen. 14, L369 (1981)
- 106) D.B. Abraham, E.R. Smith, J.Phys.A: Math.Gen. 14, 2059 (1981)
- 107) D.M. Kroll, R. Lipowsky, Phys.Rev. B26, 5289 (1982)
- 108) D.M. Kroll, R. Lipowsky, Phys.Rev. B28, 5273 (1983)
- 109) K. Binder, D.P. Landau, D.M. Kroll, J.Magn.&Magn.Mater, 54-57, im Druck
- 110) K. Binder, D.P. Landau, D.M. Kroll, Preprint (1986)
- 111) E. Brézin, B.I. Halperin, S. Leibler, J.Physique 44, 775 (1983)
- 112) E. Brézin, B.I. Halperin, S. Leibler, Phys.Rev.Lett. 50, 1387 (1983)
- 113) R. Lipowsky, D.M. Kroll, R.K.P. Zia, Phys.Rev. B27, 4499 (1983)
- 114) D.S. Fisher, D.A. Huse, Phys.Rev. B32, 247 (1985)
- 115) C. Forgacs, H. Orland, M. Schick, Phys.Rev. B32, 4683 (1985)
- 116) N.M. Svrakic, J.Phys. A18, L891 (1985)
- 117) M. Kardar, Phys.Rev.Lett. 55, 2235 (1985)
- 118) R. Lipowsky, M.E. Fisher, Phys.Rev.Lett. 56, 472 (1986)
- 119) O.K. Rice, J.Chem.Phys. 22, 1535 (1954)
- 120) C. Domb, J.Chem.Phys. 25, 783 (1956)
- 121) G.A. Baker, J.W. Essam, Phys.Rev.Lett. 24, 447 (1970)
- 122) D.C. Mattis, T.D. Schultz, Phys.Rev. 129, 175 (1963)
- 123) H. Wagner, J. Swift, Z.Phys. 239, 182 (1970)
- 124) A.I. Larkin, S.A. Pikin, Sov.Phys.JETP 29, 891 (1969)
- 125) J.Sak, Phys.Rev. B10, 3957 (1974)
- 126) J. Rudnick, D.J. Bergman, Y. Imry, Phys.Lett. 46A, 449 (1974)
- 127) M.E. Fisher, Phys.Rev. 176, 257 (1968)
- 128) D.J. Bergman, B.I. Halperin, Phys.Rev. B13, 2145 (1976)
- 129) H. Wagner, H. Horner, Adv.Phys. 23, 587 (1974)

- 130) H. Wagner, in : Hydrogen in Metals, Hrsg. G. Alefeld, J. Völkl;
Berlin, Heidelberg, New York, Springer 1978
Experimentelle Aspekte sind im gleichen Buch behandelt von H. Peisl.
- 131) Die Irrelevanz der Makromoden im Sinne der Renormierungsgruppe zeigte
F.J. Wegner, J.Phys. C7, 2109 (1974)
- 132) M.D. Rechtin, S.C. Moss, B.L. Averbach, Phys.Rev.Lett. 24, 1485 (1970)
- 133) M.D. Rechtin, B.L. Averbach, Phys.Rev.Lett. 26, 1483 (1970)
- 134) H. Zabel, B. Schönfeld, S.C. Moss, J.Phys.Chem.Solids 42, 897 (1981)
- 135) Das Wachsen von Domänenwänden in Ferroelektrika wird auf die gleiche Weise
verhindert : J. Layzerowicz, Ferroelectrics 35, 219 (1981)
- 136) C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, New York, Wiley 1976
- 137) Ref. 10, S. 141
- 138) A. Hubert, Theorie der Domänenwände in geordneten Medien,
S. 310. Berlin, Heidelberg, New York, Springer 1974
- 139) V.V. Gann, A.I. Zhukov, Sov.Phys.Solid State 24, 1584 (1982)

Für die gute Zusammenarbeit in den letzten Jahren möchte ich Dr. H. W. Diehl, G. Gompper, Dr. R. Lipowsky und Prof. Dr. H. Wagner ganz herzlich danken.

LEBENS LAUF

geboren am	11.3.1956
in	Saarlouis
Eltern	Claus Speth, Sparkassenangestellter Ehefrau Hedwig, geb. Hürtgen
Familienstand	ledig
Staatsangehörigkeit	deutsch
1962 - 1966	Grundschule in Saarlouis-Fraulautern
1966 - 1975	Staatl. Gymnasium Saarlouis Abschluß: Abitur
1975 - 1976	Wehrdienst in Koblenz
1976 - 1982	Studium der Physik an der Ludwig- Maximilians-Universität München
1982	Diplom mit einer Arbeit in theoret- ischer Physik bei Prof. H. Wagner über Phasenübergänge an Oberflächen.
seit 1982	wissenschaftlicher Angestellter der Universität München.

München, den 9. April 1986

